G. BAUMGÄRTNER / P. SCHUCK

Schalenmodell

Deformationen

Vibrationen

Optisches Modell

Kurbelmodell

Invarianzen

Rotationen

Superflüssigkeitsmodell

KERNMODELLE



HOCHSCHULTASCHENBÜCHER
BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT
203/203a*

B·I-HOCHSCHULTASCHENBÜCHER

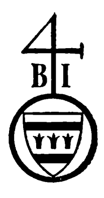
203/203 a*

KERNMODELLE

VON

GERMAN BAUMGÄRTNER
PETER SCHUCK

PHYSIK-DEPARTMENT DER TH MÜNCHEN



BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT · MANNHEIM/ZÜRICH

HOCHSCHULTASCHENBÜCHER-VERLAG

Gesamtherstellung: Zechnersche Buchdruckerei, Speyer
Bindearbeit: Lachenmaier, Reutlingen
Printed in Germany
A

VORWORT

In den letzten zwei Jahrzehnten konnten die Kenntnisse über die Struktur der Atomkerne durch die Entwicklung von Modellvorstellungen wesentlich verbessert werden. Einfach zu überblickende mathematische Ansätze und die ihnen zugrundeliegenden physikalischen Bilder erwiesen sich als äußerst fruchtbar in der Bemühung, System in das unübersichtliche Material der experimentellen Daten zu bringen. Mit fortschreitender Verfeinerung solcher Kernmodelle gelang dabei nicht nur eine qualitative, sondern oft auch eine befriedigende quantitative Beschreibung der beobachteten Phänomene.

Um diese in stetigem Austausch mit anderen Gebieten der Physik entwickelten Methoden einem möglichst weiten Leserkreis zugänglich zu machen, wird in dem vorliegenden Buch bewußt auf den Versuch einer streng deduktiven Herleitung der Modelle verzichtet und stattdessen ein induktiver, das physikalische Bild betonender Weg gewählt. Die Vorkenntnisse, die nötig sind, um diesen Weg beschreiten zu können, beschränken sich in etwa auf den Stoff einer Grundvorlesung über Quantenmechanik.

Die Idee zu diesem Buch entstammt einem theoretischen Seminar, das die Verfasser im WS 1966/67 gemeinsam geleitet haben. Allen Teilnehmern an diesem Seminar sei hier für ihre fruchtbare Mitarbeit gedankt.

Für einen wesentlichen Beitrag zum Gelingen dieses Buches sind die Autoren Herrn Professor Dr. H. J. Mang sehr zu Dank verpflichtet. Er übernahm die Durchsicht des Manuskripts und steuerte sowohl bei der Auswahl des Stoffes als auch bei der Klärung zahlreicher Detailfragen seine Erfahrung in Rat und Tat bei. Er half somit, die vorliegende Arbeit in wichtigen Punkten mitzugestalten. Ebenfalls sei Herrn Professor Dr. W. Wild für eine Reihe wertvoller und kritischer Kommentare gedankt.

Aus einer Vorlesung von Herrn Professor Dr. W. Brenig wurde mit seiner freundlichen Genehmigung die Darstellung der Feldquantisierung entnommen. Die Verfasser sind weiter Herrn Dipl.-Phys. F. Wegner verbunden, der beim Lesen von Korrekturen behilflich war und dabei auch auf einige sachliche Widersprüche aufmerksam machte.

Auch allen Kollegen sei für manche Diskussion gedankt. Besonderen Dank sind die Autoren den Herren vom Bibliographischen Institut schuldig, die ihren Wünschen, wann immer möglich, entgegenkamen. Schließlich sei auch Frau M. Schmidt nicht vergessen, die die oft unleserlichen Handschriften in ein setzfähiges Manuskript verwandelte.

München, Juni 1967

G. Baumgärtner
P. Schuck

INHALTSVERZEICHNIS

I. DAS SCHALENMODELL

1. Allgemeines

Ein Atomkern der Massenzahl A und der Ladung Z besteht aus Z Protonen und A–Z Neutronen. Es scheint zunächst außerordentlich schwierig zu sein, die Dynamik dieses Systems von A Nukleonen zu verstehen. Ein Hauptproblem hierbei ist, daß bislang noch keine befriedigende Theorie der Kernkräfte existiert, die auf allgemeinen Prinzipien aufgebaut ist. So kann man z.B. die Schrödingergleichung nur dann verwenden, wenn die Wechselwirkungen durch Potentiale darstellbar sind. Da jedoch charakteristische Geschwindigkeiten von gebundenen Nukleonen in einem Kern von der Größenordnung $\frac{1}{5}$ Lichtgeschwindigkeit sind, ergibt sich eine gewisse Berechtigung, die nichtrelativistische Schrödingergleichung mit Wechselwirkungspotential an die Spitze aller weiteren Überlegungen zu stellen:

$$\{T(1,\ldots,i,\ldots,A)+V(1,\ldots,i,\ldots,A)\}\,\Psi(1,\ldots,i,\ldots,A)=E\,\Psi(1,\ldots,i,\ldots,A) \quad \text{(I.1)}$$

($i=$ Gesamtheit aller Koordinaten des i-ten Teilchens)

und damit auf eine lorentzinvariante Formulierung der Kerntheorie zu verzichten.

Auch Gleichung (I.1) ist jedoch exakt völlig unlösbar, selbst wenn man annimmt, daß V nur aus Zweiteilchenpotentialen besteht

$$V(1,\ldots,A)=\sum_{\substack{i,j=1\\(i<j)}}^{A} v(i,j), \quad \text{(I.2)}$$

d.h. daß die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen nicht von den Koordinaten der übrigen Nukleonen abhängt.

Ein Ausweg aus diesem Dilemma ist die Konstruktion von Modellen, die einerseits aus (I.1) begründet werden können, andererseits von einer mathematischen Struktur sind, die die Vorhersage meßbarer Größen erlaubt. Die Gültigkeitsbereiche dieser Modelle sind durch Vergleich mit dem Experiment festzulegen. In diesen Modellvorstellungen ist damit ein konsistentes Bild von der Struktur des Kerns zusammengefaßt.

An der Spitze dieser Entwicklung stehen statistische bzw. Kontinuumsmodelle, die den Kern als Hartkugelgas oder Flüssigkeitstropfen be-

schreiben. Es leuchtet ein, daß solche Modelle nicht die von Kern zu Kern schnell veränderlichen Eigenschaften, wie Bindungsenergien, elektromagnetische Momente, Spins etc. erfassen können, sondern lediglich ein grobes Bild der Eigenschaften von Kernmaterie vermitteln. Eine Fülle experimentellen Materials über solche schnell mit der Massenzahl veränderliche Kerneigenschaften führte schließlich zur zweiten Generation von Kernmodellen, die man als Schalenmodelle bezeichnet und deren Grundannahme die unabhängige Bewegung der Nukleonen im Kern im Gegensatz zu den Modellen der ersten Generation ist.

2. *Magische Zahlen*

Die sogenannten *magischen Zahlen* 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 stellen experimentell den stärksten Beweggrund für die Formulierung eines Schalenmodells dar, da bei solchen Protonen- bzw. Neutronenzahlen

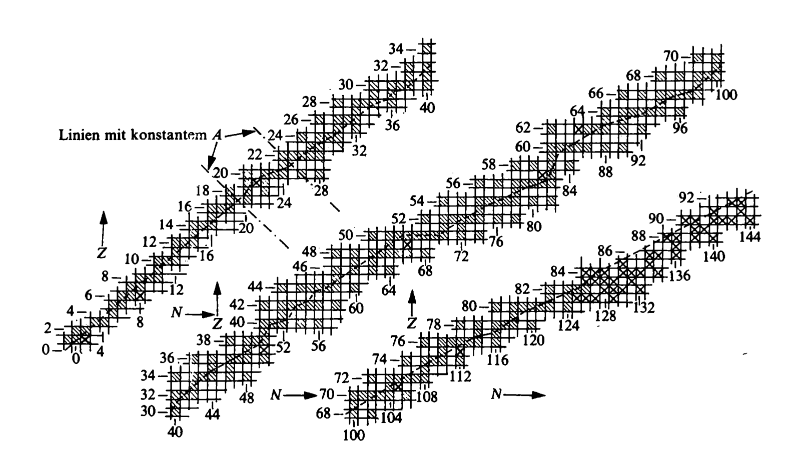


Fig. 1 Tafel der natürlichen Kerne. Jedes Quadrat entspricht einer Kernladungszahl Z und einer Neutronenzahl N. Die Quadrate, welche stabilen Kernen entsprechen, sind schraffiert, diejenigen von natürlich radioaktiven Kernen sind durch ein x gekennzeichnet (Wigner, Eisenbud [WE 61], S. 12).

Effekte analog zum Schalenabschluß in der Atomhülle beobachtet werden. Das Auftreten der magischen Zahlen soll an einigen Beispielen dargestellt werden.

a) Aus Fig. 1 kann man ablesen, daß in drei Fällen die schwersten Isotope zweier benachbarter Z-gerade Kerne gleiche Neutronenzahl besitzen:

Xenon, Barium	${}_{54}\mathrm{Xe}_{82}^{136}$	${}_{56}\mathrm{Ba}_{82}^{138}$	$(N=82)$,
Krypton, Strontium	${}_{36}\mathrm{Kr}_{50}^{86}$	${}_{38}\mathrm{Sr}_{50}^{88}$	$(N=50)$,
Calzium, Titan	${}_{20}\mathrm{Ca}_{28}^{48}$	${}_{22}\mathrm{Ti}_{28}^{50}$	$(N=28)$.

Ebenfalls nach Fig. 1 haben die leichtesten Isotope zweier benachbarter Z-gerade Kerne gleiche Neutronenzahl:

Neodym, Samarium	${}_{60}\mathrm{Nd}_{82}^{142}$	${}_{62}\mathrm{Sm}_{82}^{144}$	$(N=82)$,
Zirkonium, Molybdän	${}_{40}\mathrm{Zr}_{50}^{90}$	${}_{42}\mathrm{Mo}_{50}^{92}$	$(N=50)$.

b) Der Übergang von stabilen A-ungeraden zu stabilen $(A+2)$-Kernen erfolgt im allgemeinen durch den Einbau eines Protons und eines Neutrons oder zweier Neutronen (wachsender Neutronenexzeß $N-Z$). Addition von zwei Protonen führt auf instabile Kerne (Fig. 1).

Hiervon sind drei Ausnahmen bekannt:

$${}_{17}\mathrm{Cl}_{20}^{37} \xrightarrow{\text{Einbau von 2p}} {}_{19}\mathrm{K}_{20}^{39} \quad ({}_{18}\mathrm{Ar}_{21}^{39} \text{ instabil}) \quad (N=20),$$

$${}_{37}\mathrm{Rb}_{50}^{87} \xrightarrow{\text{Einbau von 2p}} {}_{39}\mathrm{Y}_{50}^{89} \quad ({}_{38}\mathrm{Sr}_{51}^{89} \text{ instabil}) \quad (N=50),$$

$${}_{57}\mathrm{La}_{82}^{139} \xrightarrow{\text{Einbau von 2p}} {}_{59}\mathrm{Pr}_{82}^{141} \quad ({}_{58}\mathrm{Ce}_{83}^{141} \text{ instabil}) \quad (N=82).$$

c) In der Natur kommen sechs Kerne mit $N=50$ vor, sieben mit $N=82$.

Zinn $(Z=50)$ hat 10 natürlich vorkommende Isotope, die sich über *dreizehn* Masseneinheiten erstrecken; darunter sind drei stabile ungerade Kerne.

Die natürlich vorkommenden Isotope von $Z=54$ (Xe) bzw. $Z=62$ (Sm) umfassen einen Massenbereich von 13 bzw. 11 Masseneinheiten, was der besonderen Stabilität der Isotope mit $N=82$ zuzuschreiben ist. So ist z.B. ${}_{62}\mathrm{Sm}_{82}^{144}$ stabil, während der tiefer im Energietal liegende Kern ${}_{62}\mathrm{Sm}_{84}^{146}$ nicht natürlich vorkommt.

d) Der doppelt magische Kern ${}_{2}\mathrm{He}_{2}^{4}$ ist außergewöhnlich stabil. Die Bindungsenergien eines fünften Teilchens sind negativ, d.h. ${}_{2}\mathrm{He}_{3}^{5}$ und ${}_{3}\mathrm{Li}_{2}^{5}$ sind instabil. Ähnliche Effekte beobachtet man bei anderen magischen Zahlen. Zeichnet man z.B. die Bindungsenergien eines zusätzlichen Teilchens für gerade-gerade Kerne auf, d.h. die Energiedifferenzen

$$E_{\mathrm{B}}^{(\mathrm{Neutr.})} = {}_{Z}E_{N}^{A} + c^2\, m_{\mathrm{Neutr.}} - {}_{Z}E_{N+1}^{A+1}, \tag{I.3a}$$

$$E_{\mathrm{B}}^{(\mathrm{Prot.})} = {}_{Z}E_{N}^{A} + c^2\, m_{\mathrm{Prot.}} - {}_{Z+1}E_{N}^{A+1}, \tag{I.3b}$$

so weisen die Unstetigkeiten bei 8 und 20 auf die geringe Bindungsenergie des 9. bzw. 21. Teilchens hin (Fig. 2a und 2b).

e) Beim β-Zerfall einer Reihe von Kernen mit gleichem Neutronenexzeß

$$ {}_Z X^A_{N+1} \underset{\beta^+}{\overset{\beta^-}{\rightleftharpoons}} {}_{Z+1}X^A_N \quad (Z, N \text{ gerade}) $$

sollte man für kleines A zunächst β^--Prozesse erwarten mit abnehmender β^--Energie für zunehmende Massenzahl A. Schließlich sollten die Kerne instabil gegen Elektroneneinfang bzw. β^+-Emission werden (Fig. 3).

Das Experiment zeigt jedoch, daß sich das 51. bzw. 83. Neutron bevorzugt in ein Proton umwandelt, während das 51. Proton sich bevorzugt durch einen β^+-Prozeß in ein Neutron verwandelt (Fig. 4).

f) Auch bei direkter Bestimmung der Bindungsenergie des letzten Neutrons, z. B. aus der Schwelle des Kernphotoeffekts oder aus stripping-(d, p)-Reaktionen findet man ausgeprägte Unstetigkeiten bei den magischen Zahlen.

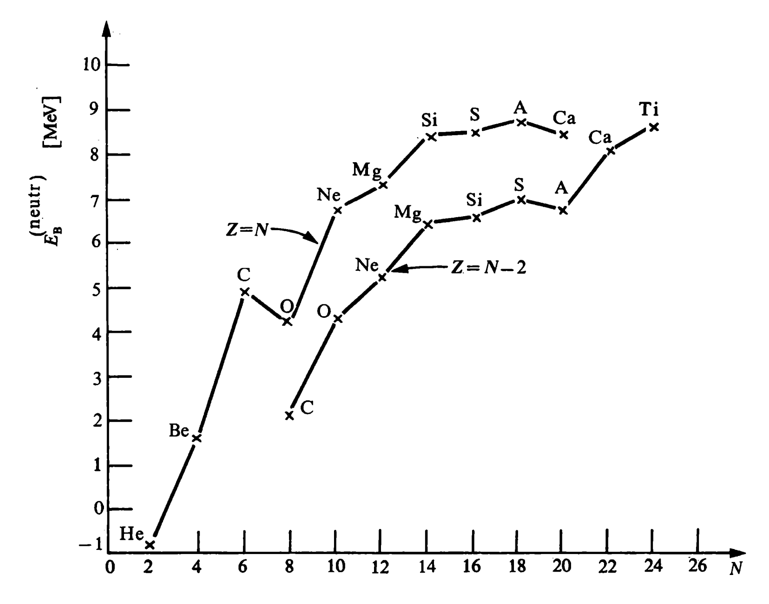


Fig. 2a Bindungsenergie eines zusätzlichen Neutrons bei (Z, N gerade)-Kernen (Mayer, Jensen [MJ 55]).

Fig. 2b Bindungsenergie eines zusätzlichen Protons bei (Z, N gerade)-Kernen [MJ 55].

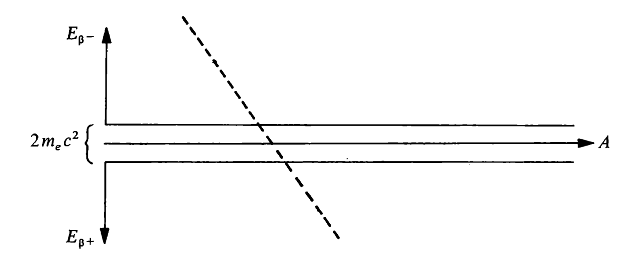


Fig. 3 β-Instabilität von Kernen mit gleichem Neutronenexzeß nach einem Kontinuumsmodell.

Alle diese Beispiele (weitere Einzelheiten sind zu entnehmen aus [MJ 55]) zeigen, daß die Bindungsenergien von Kernen mit magischen Nukleonenzahlen besonders groß sind, ein zusätzliches Nukleon aber nur sehr schwach (oder überhaupt nicht) gebunden ist.

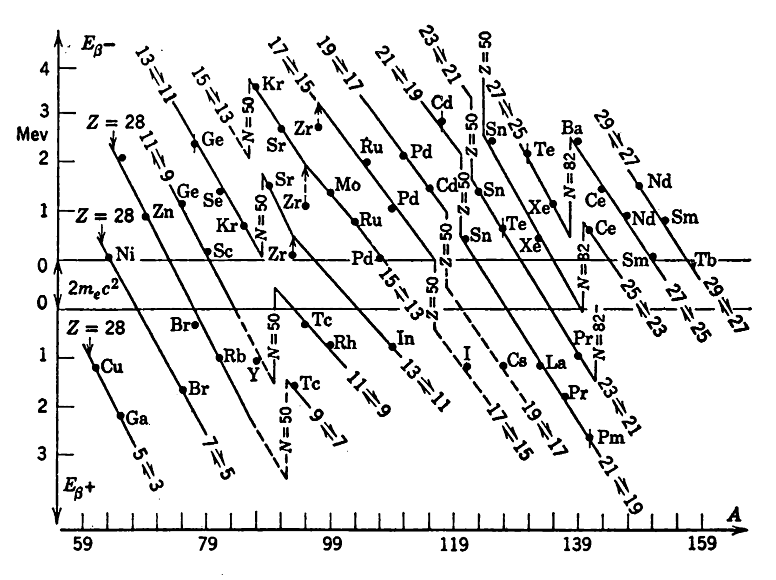


Fig. 4 β-Instabilität von Kernen mit gleichem Neutronenexzeß nach dem Experiment (näheres siehe [MJ 55], S. 25ff.).

3. *Die Schalenstruktur des Kerns*

Die experimentell gesicherte Auszeichnung der magischen Zahlen weist eine starke Ähnlichkeit mit den Verhältnissen in der Elektronenhülle der Atome auf. Hier folgt bei Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung aus der Radialsymmetrie des zentralen Coulombpotentials ein Schema von Energieniveaus, das qualitativ dadurch gekennzeichnet ist, daß zwischen den einzelnen, durch die Hauptquantenzahl charakterisierten *Schalen* große Energieabstände vorherrschen.

Für die Nukleonen im Kern existiert a priori kein solches Zentralfeld. Betrachtet man jedoch die Bewegung eines herausgegriffenen Nukleons unter dem Einfluß aller übrigen Nukleonen, so ist zumindest denkbar,

daß diese Summe von Zweiteilchenwechselwirkungen ein mittleres zeitunabhängiges Feld enthält, das wiederum in einem Zusammenhang mit der Dichteverteilung der Nukleonen stehen sollte. Ein Modell, das die Dynamik der Nukleonen nur aus einem solchen mittleren Potential berechnet, behandelt also die Nukleonen als völlig unabhängig voneinander. Ein solches Modell wird im folgenden grundsätzlich *Schalenmodell* heißen. (In der angelsächsischen Literatur ist *independent particle model* neben *shell model* gebräuchlich.) Davon zu unterscheiden ist das *Einteilchenmodell* (single particle model), das den Kern allein durch die Dynamik des am schwächsten gebundenen Nukleons beschreibt und damit analog dem Leuchtelektronenmodell der Hülle ist. Die Anwendbarkeit dieser viel spezielleren Vorstellung kann an dieser Stelle noch nicht diskutiert werden.

Die Bewegungsgleichung, die das System von A Nukleonen in Schalenmodellnäherung beschreibt, lautet also:

$$\left\{\sum_{i=1}^{A} h_i\right\}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_A) \equiv \sum_{i=1}^{A}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i + V(\boldsymbol{r}_i)\right\}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_A) = E\,\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_A). \tag{I.4a}$$

Setzt man für Ψ ein antisymmetrisiertes Produkt aus Einteilchenwellenfunktionen φ an, so erhält man die folgende Einteilchen-Schrödingergleichung:

$$h_i\varphi_j(\boldsymbol{r}_i) = \varepsilon_j\varphi_j(\boldsymbol{r}_i). \tag{I.4b}$$

Bei einer irgendwie gearteten Lösung des Problems (I.1) sind eine Reihe zusätzlicher Bedingungen zu erfüllen, die man allgemein als Symmetrien oder Invarianzen des Systems bezeichnet, wie zum Beispiel die Translationsinvarianz (Homogenität des Raumes), die Drehinvarianz (Isotropie des Raumes) etc. Mathematisch läßt sich diese Aufgabe ausdrücken als simultane Diagonalisation eines Systems vertauschbarer Operatoren, da die Invarianzbedingungen Vertauschbarkeit des Hamiltonoperators mit den betreffenden Symmetrieoperatoren bedeuten. Im Schalenmodell ist eine dieser Invarianzen immer verletzt: die *Translationsinvarianz*. Dies rührt her von der Auszeichnung eines bestimmten Raumpunktes, an den wir das Schalenmodellpotential setzen, was im Widerspruch zur Homogenität des Raumes steht. Die unangenehmste Folge dieses (zunächst nicht vermeidbaren) Vorgehens ist das Auftreten von *Geisterzuständen* (spurious states) im Anregungsspektrum des Systems auf Grund von überzähligen Freiheitsgraden, da das System bei festgehaltenem Schwerpunkt nur $3A-3$ Freiheitsgrade besitzt, das Schalenmodell jedoch

$3A$ Variable enthält. Solche Geisterzustände können also keine echten inneren Anregungen des Systems sein, sondern entsprechen Bewegungen des Kerns als Ganzem. Fast alle Näherungslösungen der Kernphysik sind mit Invarianzverletzungen erkauft. Wir werden uns daher in Kapitel X sehr ausführlich mit Methoden zur Behebung solcher Fehlerquellen befassen. Trotzdem seien schon hier für die Translation zwei Auswege aufgezeigt.

Die Produktwellenfunktion des Schalenmodells ist wegen Verletzung der Translationsinvarianz keine Eigenfunktion des Schwerpunktsimpulses. Man kann aber aus Schalenmodellfunktionen in folgender Weise eine solche Eigenfunktion gewinnen

$$\Phi_{\boldsymbol{K}}(1 \dots A) = \int e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}}\, \Psi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{a}, \dots, \boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{a})\, d^3 a\,, \tag{I.5}$$

wobei sich $\Psi(\boldsymbol{r}_1 \dots \boldsymbol{r}_A)$ nach (I.4a, b) berechnet.

Wendet man den Operator des Gesamtimpulses $\boldsymbol{P}$ auf $\Phi_{\boldsymbol{K}}$ an, so folgt:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P}\Phi_{\boldsymbol{K}} &= \sum_{n=1}^{A} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_n} \int e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}}\, \Psi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{a}, \dots, \boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{a})\, d^3 a \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{a}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\, \Psi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{a}, \dots, \boldsymbol{r}_A - \boldsymbol{a})\, d^3 a \\ &= \hbar \boldsymbol{K} \Phi_{\boldsymbol{K}}. \end{aligned} \tag{I.6}$$

Ein weiterer mathematischer Trick (Landau, Lifschitz [LL 65], S. 464), der insbesondere bei der Berechnung von Erwartungswerten in Schalenmodellnäherung von Bedeutung ist, lautet:

$$\langle \Psi_a | F(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{p}_i) | \Psi_b \rangle \rightarrow \langle \Psi_a^{(S)} | F\left(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{R}, \boldsymbol{p}_i - \frac{\boldsymbol{P}}{A}\right) | \Psi_b^{(S)} \rangle\,. \tag{I.7}$$

Hierbei sind $|\Psi_a\rangle, |\Psi_b\rangle$ exakte A-Teilchenzustände, F eine Funktion der Orts- und Impulsoperatoren der A-Teilchen, $|\Psi_{a,b}^{(S)}\rangle$ die zugehörigen Schalenmodellnäherungen und $\boldsymbol{R}$ bzw. $\boldsymbol{P}$ der Orts- bzw. Impulsoperator des Kernschwerpunkts.

Wir haben bislang nur allgemeine Konsequenzen der Schalenmodellnäherung erörtert und müssen nun für die weiteren Überlegungen zunächst die Form des a priori angesetzten Schalenmodellpotentials diskutieren. Befindet sich ein Nukleon in der Nähe des Kernzentrums, so wirken die Kernkräfte von allen Seiten, d. h. wir werden von $V(\boldsymbol{r})$ verlangen:

$$\left(\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial r}\right)_{r=0} = 0\,. \tag{I.8}$$

Am Kernrand ($r \simeq R_0$) überwiegen die anziehenden Kräfte der Nukleonen auf der Innenseite, d. h.:

$$\left(\frac{\partial V(r)}{\partial r}\right)_{r<R_0} > 0. \tag{I.9}$$

Wegen der endlichen Reichweite der Kernkräfte setzen wir:

$$V(r) \simeq 0, \qquad r > R_0. \tag{I.10}$$

Ein analytischer Ansatz, der diesen Forderungen genügt und der auch die Dichteverteilung eines Kernes gut approximiert (Hofstadter et al. [Ho 56]), ist die Fermifunktion (Fig. 5) (auch Woods-Saxon-Potential genannt):

$$V^{\text{W.S.}}(r) = -V_0\left[1+\exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)\right]^{-1} \tag{I.11}$$

mit

$$R_0 = r_0 A^{1/3},$$
$$V_0 \simeq 50\ \text{MeV},$$
$$a \simeq 0{,}5\ \text{fm},$$
$$r_0 \simeq 1{,}1\ \text{fm}.$$

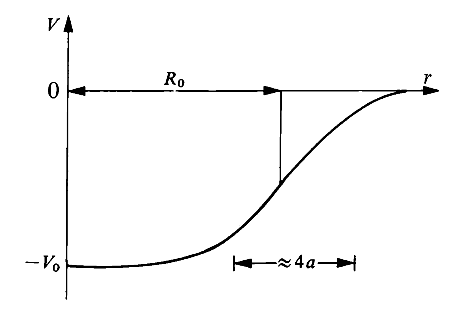


Fig. 5 Das Woods-Saxon-Potential.

Da sich die Lösungen von Gleichung (I.4b) für dieses Potential nicht in geschlossener Form darstellen lassen (Faessler, Sheline [FS 66]), benutzt man gewöhnlich für qualitative Überlegungen und auch für Rechnungen, die unempfindlich sind gegen die Radialabhängigkeit des Potentials, zwei Näherungen, die die Fermifunktion ungefähr einschließen:

a) harmonischer Oszillator

$$V(r) = -V_0\left[1-\left(\frac{r}{R_0}\right)^2\right] \tag{I.12a}$$

$$= \frac{m}{2}\omega^2(r^2-R_0^2), \tag{I.12b}$$

b) Kastenpotential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{für} \quad r \le R_0 \\ +\infty, & \text{für} \quad r > R_0. \end{cases} \tag{I.13}$$

Bevor wir näher auf die Lösungen von (I.11), (I.12) und (I.13) eingehen, ist zu betonen, daß es sich bei allen drei Formen um kugelsymmetrische Potentiale handelt, auf die wir uns zunächst ausschließlich beschränken wollen. (Die Erscheinung der Kerndeformation wird in späteren Kapiteln ausführlich diskutiert werden.) Weiter ist zu bemerken, daß (I.12) und (I.13) insofern unphysikalische Potentiale darstellen, als $V(r)$ unendlich hoch wird. Solange man sich nur für gebundene Zustände interessiert und V_0 genügend groß ist, beeinflußt dies jedoch nur den in Wirklichkeit exponentiellen Abfall der Wellenfunktion für $r > R_0$.

Nach diesen Vorbemerkungen wollen wir jetzt die aus (I.4b) und (I.12), (I.13) berechneten Energieniveaus angeben (Fig. 6) und einige einfache Folgerungen ziehen.

Im harmonischen Oszillator sind die Energieniveaus äquidistant

$$\varepsilon_N = \hbar\omega(N+\tfrac{3}{2}) - V_0 \tag{I.14a}$$

mit

$$N = 2(n-1)+l, \qquad n = 1,2,\ldots; \qquad l = 0,1,2,\ldots \tag{I.14b}$$

Sie sind entartet mit einem Entartungsgrad:

$$D(N) = \tfrac{1}{2}(N+1)(N+2). \tag{I.15}$$

N ist die Zahl der Oszillatorquanten, n die Radialquantenzahl, l die Bahndrehimpulsquantenzahl und ω die Oszillatorfrequenz (vgl. Moszkowski [Mo 57], S. 469). Die Gruppe der Niveaus mit einem bestimmten N heißt eine *Oszillatorschale*. Wegen (I.14b) enthält eine Oszillatorschale immer nur gerade oder ungerade l-Werte, d. h. sie umfaßt nur Zustände gleicher Parität. Aus (I.14b) folgt auch, daß Zustände mit verschiedenem l und n entartet sind. Diese zufällige Oszillatorentartung ist im Kastenpotential aufgehoben (Fig. 6). Die wahren Energieniveaus liegen zwischen den beiden Grenzfällen (I.12), (I.13).

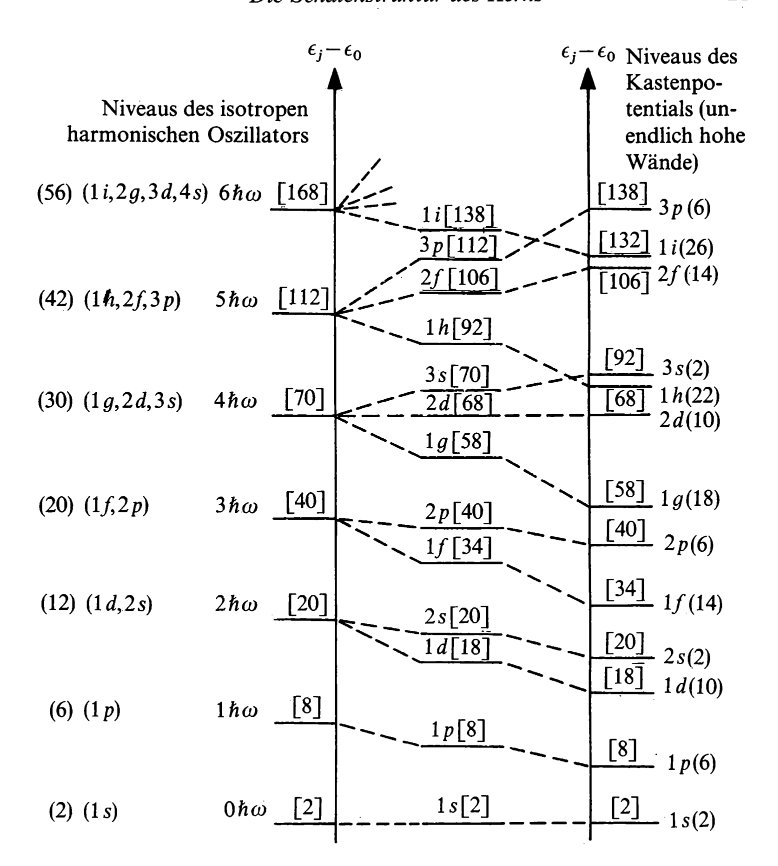


Fig. 6 Niveauschema des isotropen harmonischen Oszillators (links) und des Kastenpotentials mit unendlich hohen Wänden (rechts) [MJ 55].

Füllt man analog zum Periodensystem der Atome Nukleonen in das berechnete Niveauschema ein, so bewirkt das Pauliprinzip, daß in jeder Oszillatorschale 2 $D(N)$ Protonen und 2 $D(N)$ Neutronen Platz haben. (Die Auswirkungen des Pauliprinzips beim Auffüllen der Schalen werden im Abschnitt 5 ausführlicher diskutiert.) Das heißt jedoch, daß von beiden Potentialen (Fig. 6) die magischen Zahlen 2, 8, 20 eindeutig reproduziert werden. Dieses Modell vermag also die ungewöhnliche Stabilität von ${}_2\mathrm{He}_2^4$, ${}_8\mathrm{O}_8^{16}$ und ${}_{20}\mathrm{Ca}_{20}^{40}$ zu erklären. Dagegen enthält Fig. 6 keine An-

zeichen für die höheren magischen Zahlen. Die Vorhersage der niederen magischen Zahlen ist also entweder rein zufällig und damit das Schalenmodell unbrauchbar, oder ein wichtiger Punkt ist in den bisher entwickelten Vorstellungen noch nicht berücksichtigt worden.

4. Die Spin-Bahn-Kopplung

Bisher war vom Spin der Nukleonen mit Ausnahme eines Faktors 2 bei Bestimmung der magischen Zahlen 2, 8, 20 nicht die Rede, d. h. bisher betrachteten wir die Kernkräfte als spinunabhängig. Untersucht man die Elektronenhülle der Atome, so findet man bei einer relativistischen Behandlung des Elektrons eine spinabhängige Kraft in Form einer Spin-Bahn-Kopplung

$$f(r)\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}, \tag{I.16}$$

die zu einer Aufspaltung der beiden entarteten Niveaus mit $j=l\pm\frac{1}{2}$ führt.

Auch im Kern hat man eine solche Aufspaltung experimentell festgestellt. Streut man z. B. Protonen oder Neutronen an α-Teilchen, so sollte der niedrigste Resonanzzustand der (ungebundene) Grundzustand von Li^5 oder He^5 sein. Nach Fig. 6 sollten diese niedrigsten Resonanzen die Quantenzahlen $l=1, j=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ besitzen, da in He^4 gerade die 1s-Schale abgeschlossen ist. Man beobachtet Resonanzen bei 1,25 bzw. 2,4 MeV für die Streuung von Neutronen bzw. Protonen. Bei diesen Energien werden (wie die Analyse der Winkelverteilungen zeigt) bevorzugt $(j=\frac{3}{2})$-Teilchen gestreut, während die $(j=\frac{1}{2})$-Resonanzen einige MeV höher liegen.

Es war die entscheidende Idee von M. Goeppert-Mayer und J. H. D. Jensen, dem Hamiltonoperator h_i in (I.4) einen starken Spin-Bahn-Term hinzuzufügen. Erst dadurch wurde der endgültige Erfolg des Schalenmodells sichergestellt. Mathematisch führt er zu einer jj-Kopplung, da $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$ zwar mit $\boldsymbol{s}^2, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{j}^2, j_z$ vertauscht, nicht aber mit l_z und s_z. Die Zustände werden in dieser Kopplung durch die Quantenzahlen n, l, j charakterisiert, z. B.:

$$(2\mathrm{d}\tfrac{5}{2}) \mathrel{\hat{=}} (n=2, l=2, j=2+\tfrac{1}{2}). \tag{I.17}$$

Mit der Beziehung

$$2\hbar^2\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}\,|lsjm\rangle = \hbar^2(\boldsymbol{j}^2-\boldsymbol{l}^2-\boldsymbol{s}^2)\,|lsjm\rangle = \hbar^2\left[j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{3}{4}\right]|lsjm\rangle \tag{I.18}$$

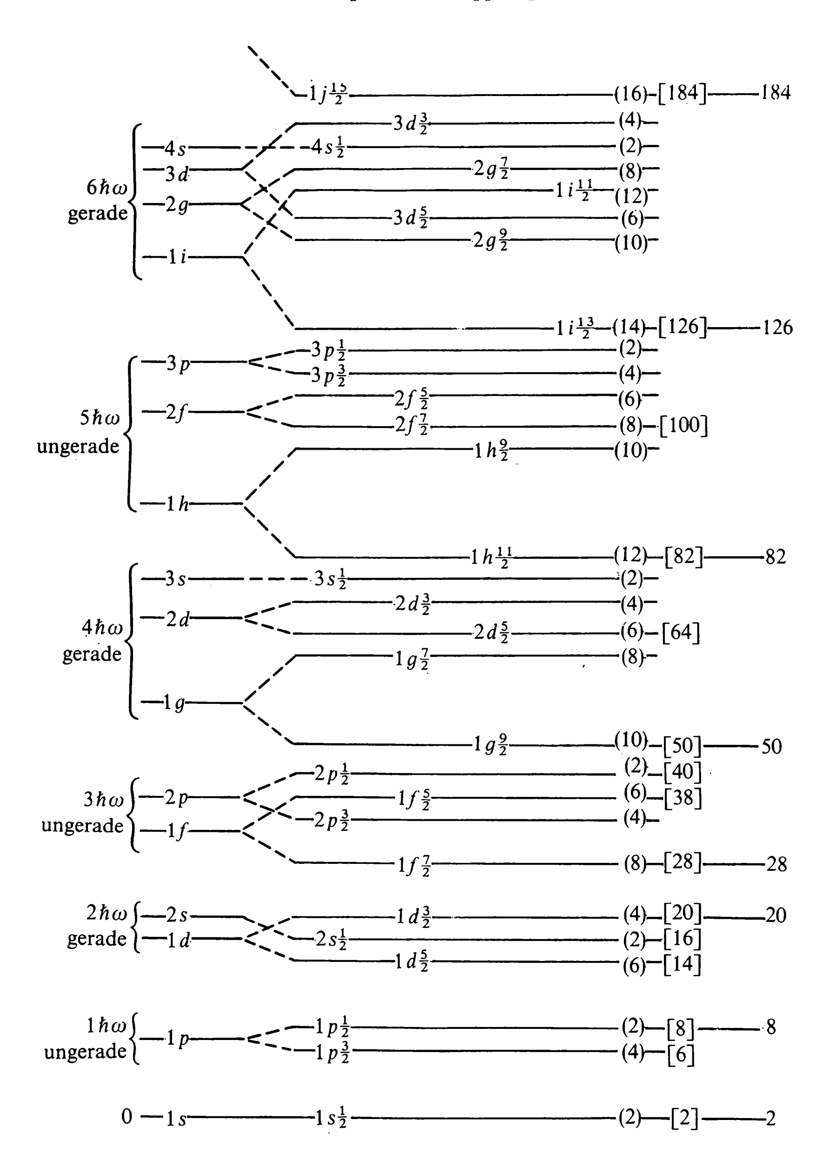


Fig. 7 Schematische Kernniveaus mit Spin-Bahn-Aufspaltung.

können wir die Spin-Bahn-Aufspaltung des zweifach entarteten Niveaus $|lsm_l \pm \frac{1}{2}\rangle$ für $f(r) = \text{const}$ sofort angeben

$$\Delta E(l) \sim [l - (-l-1)] = 2l+1, \tag{I.19}$$

wobei ein anziehendes Spin-Bahn-Potential dafür sorgt, daß das $(l+\frac{1}{2})$-Niveau stets energetisch tiefer als das $(l-\frac{1}{2})$-Niveau liegt. (I.19) zeigt ferner, daß die Aufspaltung mit wachsendem l zunimmt.

Ausgehend vom mittleren Termschema von Fig. 6 liefert die Berücksichtigung des Spin-Bahn-Terms Fig. 7. Das Modell gibt jetzt alle magischen Zahlen korrekt wieder. Die Reihenfolge der Niveaus in den einzelnen Schalen hängt von der Wahl von $f(\boldsymbol{r})$ ab.

Der Wert von $f(\boldsymbol{r})$, den man in Analogie zur Elektronentheorie der Hülle aus einer lorentzinvarianten Behandlung der elektromagnetischen Wechselwirkung der Nukleonen herleiten könnte (Thomas-Term; vgl. [MJ 55], S. 60) ist, verglichen mit experimentell gemessenen Spin-Bahn-Aufspaltungen, etwa eine Größenordnung zu klein. Die Spin-Bahn-Kräfte im Kern müssen sich also überwiegend aus der starken Wechselwirkung begründen lassen, deren Mechanismus jedoch bis heute noch nicht so aufgeklärt ist, daß eine Aussage über $f(\boldsymbol{r})$ möglich wäre.

5. *Das Auffüllen der Schalen*

Allgemeines Prinzip. Bevor wir auf weitere Details eingehen können, wollen wir etwas genauer als bisher diskutieren, in welcher Weise in den Rahmen, den wir durch Lösung des Einteilchenproblems (I.4b) unter Berücksichtigung eines Spin-Bahn-Terms gewonnen haben, das A-Nukleonenproblem einzufügen ist. Dieser Rahmen wird schematisch durch Fig. 7 dargestellt.

Da die Nukleonen Fermionen sind (Spin $\frac{1}{2}$), muß ein A-Nukleonenzustand total antisymmetrisch gegen Vertauschung der N Neutronen untereinander und der Z Protonen untereinander sein. Mathematisch kann man diesen Sachverhalt besonders einfach für eine A-Teilchenproduktwellenfunktion ausdrücken, wie sie sich beispielsweise als Schalenmodellösung des A-Nukleonenproblems ergibt:

$$\begin{aligned}\mathscr{A}_N \mathscr{A}_Z[\varphi_1(1)\ldots\varphi_A(A)] &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\frac{1}{\sqrt{Z!}}\sum_{P_N, P_Z}(-1)^{P_N+P_Z} P_N P_Z[\varphi_1(1)\ldots\varphi_A(A)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\frac{1}{\sqrt{Z!}}\det{}_N|\varphi_i(j)|\det{}_Z|\varphi_i(j)|.\end{aligned} \tag{I.20}$$

Hierbei sind $\mathscr{A}_N, \mathscr{A}_Z$ die auf Neutronen bzw. Protonen wirkenden Antisymmetrisierungsoperatoren, P_N und P_Z die entsprechenden Permutationsoperatoren.

Aus (I.20) folgt sofort, daß ein Einteilchenniveau von höchstens einem Nukleon derselben Sorte besetzt sein kann, da sonst eine der beiden *Slaterdeterminanten* $\det_{N,Z}|\varphi_i(j)|$ verschwindet.

Abgeschlossene *j*-Schalen. Damit haben wir – eindeutig zunächst nur für abgeschlossene *j*-Schalen (Fig. 7) – die Vorschrift für die Konstruktion des *A*-Teilchengrundzustandes und des *A*-Teilchenanregungsspektrums gewonnen:

Ausgehend vom $(1s\frac{1}{2})$-Niveau besetze man jeden Zustand $|nlsjm\rangle$ mit je einem Proton und einem Neutron bis alle N Neutronen und Z Protonen verbraucht sind. Unter Vernachlässigung der Coulombabstoßung der Protonen erhalten wir damit einen *A*-Nukleonengrundzustand, in dem bis zur *Fermikante* (dem obersten besetzten Niveau) alle Niveaus mit einem Proton und einem Neutron besetzt sind; oberhalb der Fermikante sind alle Niveaus unbesetzt. Die Fermikante fällt mit dem *j*-Schalenabschluß zusammen (Fig. 8a).

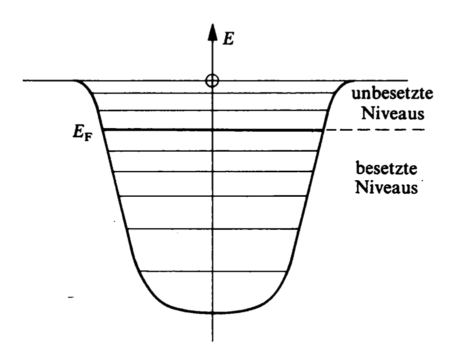


Fig. 8a Schalenmodell und Fermikante.

Die Anregungszustände des Systems im Schalenmodell sind, in Analogie zum freien Fermigas, dadurch gegeben, daß man Nukleonen aus Niveaus unterhalb der Fermikante in solche oberhalb hebt. Ein solcher

Einteilchen-Einloch-Anregungszustand (1T – 1L) mit der Anregungsenergie $\simeq \hbar\omega$ ist z. B. bei ${}_{20}\mathrm{Ca}_{20}^{40}$ gegeben durch (Fig. 7):

$$(2s\tfrac{1}{2})^{-1}(1f\tfrac{7}{2})$$

(Die Fermikante fällt hier mit der $(1d\tfrac{3}{2})$-Schale zusammen.)

Berücksichtigt man die Coulombabstoßung zwischen den Protonen, so bewegt sich ein herausgegriffenes Proton näherungsweise im Potential einer homogen geladenen Kugel der Ladung $(Z-1)e$. Um die Tiefe der Schalenmodellpotentiale für Neutronen bzw. Protonen qualitativ abschätzen zu können, denken wir uns einen Kern mit $N = Z$ und großer Masse ohne Coulombkräfte. Dann sehen beide Teilchensorten dasselbe mittlere Potential. Schalten wir jetzt die Coulombkraft ein, so werden sich unter Energiegewinn Protonen in Neutronen umwandeln, bis ein Gleichgewicht eintritt, das so beschaffen sein muß, daß die Fermikanten für Protonen und Neutronen etwa den gleichen Abstand vom Energienullpunkt haben. Dieser Abstand entspricht nämlich der Bindungsenergie des letzten hinzugefügten Nukleons, die für beide Sorten im Gleichgewichtszustand gleich sein muß, da sonst β-Zerfall einträte.

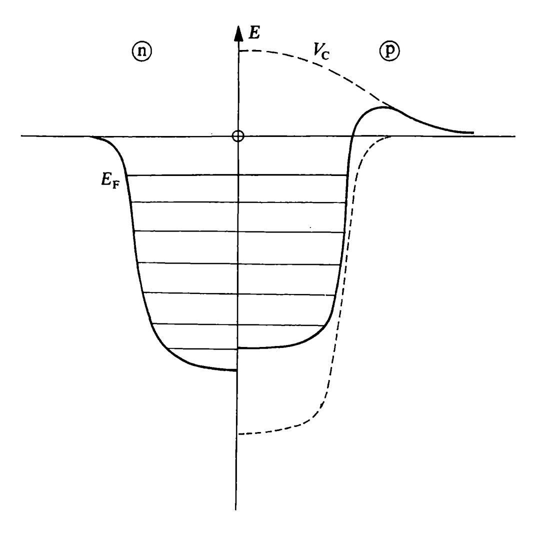


Fig. 8b Coulombeffekte im Schalenmodell.

(Diese grobe Betrachtung ist nur im Grenzfall großer Systeme richtig, für endliche Kerne unterscheiden sich die Ablösearbeiten für das letzte Neutron bzw. Proton aufgrund von Schaleneffekten oft beträchtlich; vgl. z. B. Fig. 4). Bei der Einstellung des Gleichgewichtsneutronenexzesses ist weiter zu bedenken, daß für $N > Z$ das Kernpotential der Protonen tiefer als das der Neutronen ist, da (a) Neutron-Proton-Paare energetisch begünstigt sind verglichen mit nn- bzw. pp-Paaren und (b) die mittlere kinetische Energie pro Neutron größer ist als pro Proton (vgl. auch die selbstkonsistente Hartree-Fock-Theorie in Kapitel V sowie [Mo 57], S. 434 ff.).

Das unter Berücksichtigung dieser Effekte erhaltene Protonenkernpotential ist z. B. bei Pb^{208} etwa 14 MeV tiefer als das Neutronenpotential [BW 60]. Addiert man das Coulombpotential dazu (ca. 20 MeV), dann sieht man durch Vergleich mit Fig. 7 qualitativ, daß im Gleichgewichtszustand gerade soviel Neutronen mehr als Protonen vorhanden sind, um die 126er Schale ganz mit Neutronen zu besetzen (Schalenabstand 82er zu 126er Schale ca. 6 MeV). (Siehe Fig. 8 b.)

Kerne mit abgeschlossenen j-Schalen haben im Grundzustand einen Gesamtdrehimpuls $I = 0$, der grobgesprochen so zustandekommt, daß jeweils zwei Nukleonen in den Zuständen $|jm\rangle$ und $|j-m\rangle$ zum Drehimpuls 0 koppeln. Der Grundzustand erweist sich so bei abgeschlossenen Schalen als kugelsymmetrisch.

Ein Teilchen (ein Loch) außerhalb (innerhalb) abgeschlossener j-Schalen. Fügt man zu einem gg-Kern mit abgeschlossenen j-Schalen ein Teilchen (ein Loch) hinzu, so sollte dieser ug- bzw. gu-Kern im Grundzustand den Einteilchenspin j des Teilchens (des Loches) haben.

Diese Vorhersage ist experimentell ausnahmslos bestätigt (einschließlich der zugehörigen l-Werte und Paritäten).

Unvollständig gefüllte j-Schalen. Bei Kernen mit mehr als einem Teilchen (einem Loch) in nichtabgeschlossenen j-Schalen ist die Situation komplizierter. Zur Vereinfachung der Diskussion führen wir zunächst die *inert core-* oder *Rumpf*-Näherung des Schalenmodells ein: Die Eigenschaften eines Kernes werden näherungsweise durch die außerhalb abgeschlossener j-Schalen befindlichen Nukleonen wiedergegeben. Diese Nukleonen bewegen sich im kugelsymmetrischen Potential des $(I = 0)$-Rumpfes, der nur als Potential zur Dynamik beiträgt und ansonsten als starr angenommen wird. Im Falle *eines* Nukleons außerhalb der abgeschlossenen Schalen wird diese Näherung auch als sphärisches Einteilchenmodell (SEM) bezeichnet.

Sieht man in diesem Sinne von den abgeschlossenen Protonen- und Neutronenschalen ab, so ist die *Konfiguration* des Kerns gegeben durch zwei Zahlen κ und λ, die für die Anzahl der Neutronen bzw. Protonen in teilweise gefüllten j-Schalen stehen. Sei die unvollständige Neutronenschale eines Kerns charakterisiert durch $(n l j)$, die unvollständige Protonenschale durch $(n' l' j')$, dann kennzeichnet man die Konfiguration durch

$$(\nu n l j)^{\kappa} (\pi n' l' j')^{\lambda}. \tag{I.21}$$

Die zugehörige Wellenfunktion ist ein Produkt aus κ Einteilchenzuständen $|n l j\rangle$ für die Neutronen und λ Protonenzuständen $|n' l' j'\rangle$. Infolge der m-Entartung des Schalenmodells sind alle so gebildeten Schalenmodellzustände entartet. Die Zahl der antisymmetrischen, linear unabhängigen Produkte ist gegeben durch das Produkt der Binomialkoeffizienten:

$$\binom{2j+1}{\kappa} \binom{2j'+1}{\lambda}. \tag{I.22}$$

Man kann aus diesen antisymmetrischen Produkten Linearkombinationen bilden, die Eigenfunktionen zu $\boldsymbol{J}^2$ und J_z sind mit:

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \cdots + \boldsymbol{j}_\kappa + \boldsymbol{j}_{\kappa+1} + \cdots + \boldsymbol{j}_{\kappa+\lambda}. \tag{I.23}$$

An einem einfachen Beispiel soll dies durchgeführt werden. Seien in einer $(j=\frac{3}{2})$-Schale zwei Protonen vorhanden, dann lautet die Konfiguration $(\pi\frac{3}{2})^2$. Mit (I.22) existieren $\binom{4}{2}=6$ linear unabhängige, antisymmetrische Produktwellenfunktionen, die man durch die m-Werte kennzeichnen kann:

$$|\tfrac{3}{2}\tfrac{1}{2}\rangle, |\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle, |\tfrac{3}{2}-\tfrac{3}{2}\rangle, |\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle, |\tfrac{1}{2}-\tfrac{3}{2}\rangle, |-\tfrac{1}{2}-\tfrac{3}{2}\rangle. \tag{I.24}$$

Aus diesen, den Kern in inert core-Näherung beschreibenden Zweiteilchenzuständen konstruieren wir nach den Regeln der Drehimpulskopplung einen Eigenzustand $|I M\rangle$ von $\boldsymbol{J}^2$ und J_z mit:

$$\boldsymbol{J}^2 = (\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2)^2. \tag{I.25}$$

Für $M=0$ erhält man beispielsweise[1]:

$$|I 0\rangle = \sum_m c(\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}I;\ m\, -m\, 0)\, |m\, -m\rangle = \sum_{m>0} \cdots + \sum_{m<0} \cdots \tag{I.26}$$

Unter Berücksichtigung des Pauliprinzips hat hierbei $|m\, -m\rangle$ die Form:

$$|m\, -m\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\tfrac{3}{2} m\rangle^{(1)} |\tfrac{3}{2} -m\rangle^{(2)} - |\tfrac{3}{2} m\rangle^{(2)} |\tfrac{3}{2} -m\rangle^{(1)} \right], \tag{I.27}$$

$$|m\, -m\rangle = -|-m\, m\rangle. \tag{I.28}$$

[1] Die in diesem Buch benutzten Vektorkopplungskoeffizienten $c(j_1 j_2 I; m_1 m_2 M)$ sind identisch mit den Koeffizienten $(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 I M)$ von Edmonds [Ed 64], Formel 3.5.1.

Substituiert man in der Summe über $m<0$ m durch $-m$, d.h.

$$\sum_{m<0} \dots = \sum_{m>0} c(\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}I;\, -mm0)|-mm\rangle \tag{I.29}$$

und nutzt die Symmetrien der Clebsch-Gordan-Koeffizienten aus

$$c(\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}I;\, -mm0) = (-1)^{3-I} c(\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}I;\, m-m0), \tag{I.30}$$

so folgt zusammen mit (I.28) aus (I.26)

$$|I0\rangle = \sum_{m>0} c(\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}I;\, m-m0)\{|m-m\rangle + (-1)^{3-I+1}|m-m\rangle\}, \tag{I.31}$$

Tab. 1: Mögliche Gesamtdrehimpulse I in der Konfiguration $(j)^\lambda$ ([MJ 55], S. 64).

$j=\frac{3}{2}$

$\kappa=1$ $\frac{3}{2}$.
$=2$ 0, 2.

$j=\frac{5}{2}$

$\kappa=1$ $\frac{5}{2}$.
$=2$ 0, 2, 4.
$=3$ $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2}$.

$j=\frac{7}{2}$

$\kappa=1$ $\frac{7}{2}$.
$=2$ 0, 2, 4, 6.
$=3$ $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{15}{2}$.
$=4$ 0, 2 (2-fach), 4 (2-fach), 5, 6, 8.

$j=\frac{9}{2}$

$\kappa=1$ $\frac{9}{2}$.
$=2$ 0, 2, 4, 6, 8.
$=3$ $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$ (2-fach), $\frac{11}{2}, \frac{15}{2}, \frac{17}{2}, \frac{21}{2}$.
$=4$ 0 (2-fach), 2 (2-fach), 3, 4 (3-fach), 5, 6 (3-fach), 7, 8, 9, 10, 12.
$=5$ $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ (2-fach), $\frac{7}{2}$ (2-fach), $\frac{9}{2}$ (3-fach), $\frac{11}{2}$ (2-fach), $\frac{13}{2}$ (2-fach), $\frac{15}{2}$ (2-fach), $\frac{17}{2}$ (2-fach), $\frac{19}{2}, \frac{21}{2}, \frac{25}{2}$.

$j=\frac{11}{2}$

$\kappa=1$ $\frac{11}{2}$.
$=2$ 0, 2, 4, 6, 8, 10.
$=3$ $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$ (2-fach), $\frac{11}{2}$ (2-fach), $\frac{13}{2}, \frac{15}{2}$ (2-fach), $\frac{17}{2}, \frac{19}{2}, \frac{21}{2}, \frac{23}{2}, \frac{27}{2}$.
$=4$ 0 (2-fach), 2 (3-fach), 3, 4 (4-fach), 5 (2-fach), 6 (4-fach), 8 (4-fach), 9 (2-fach), 10 (3-fach), 11, 12 (2-fach), 13, 14, 16.
$=5$ $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ (2-fach), $\frac{5}{2}$ (3-fach), $\frac{7}{2}$ (4-fach), $\frac{9}{2}$ (4-fach), $\frac{11}{2}$ (5-fach), $\frac{13}{2}$ (4-fach), $\frac{15}{2}$ (5-fach), $\frac{17}{2}$ (4-fach), $\frac{19}{2}$ (4-fach), $\frac{21}{2}$ (3-fach), $\frac{23}{2}$ (3-fach), $\frac{25}{2}$ (2-fach), $\frac{27}{2}$ (2-fach), $\frac{29}{2}, \frac{31}{2}, \frac{35}{2}$.
$=6$ 0 (3-fach), 2 (4-fach), 3 (3-fach), 4 (6-fach), 5 (3-fach), 6 (7-fach), 7 (4-fach), 8 (6-fach), 9 (4-fach), 10 (5-fach), 11 (2-fach), 12 (4-fach), 13 (2-fach), 14 (2-fach), 15, 16, 18.

d.h.

$$|I0\rangle \neq 0, \quad \text{nur für} \quad I=0,2 \quad (I \leq 2j). \tag{I.32}$$

In der Konfiguration $(\pi\frac{3}{2})^2$ sind also die total antisymmetrisierten Eigenfunktionen

$$|00\rangle, |22\rangle, |21\rangle, |20\rangle, |2-1\rangle, |2-2\rangle$$

des Gesamtdrehimpulses miteinander entartet. Welcher Zustand der Grundzustand ist, kann in dieser Näherung nicht entschieden werden.

Im allgemeinen sind diese Rechnungen etwas mühsam. In Tab. 1 sind die möglichen Gesamtdrehimpulse für reine Protonenkonfigurationen angegeben.

Kopplungsregeln. Die Entartung aller zu einer Konfiguration gehörenden Zustände $|\alpha I M\rangle$ (α ist die Abkürzung für alle anderen Quantenzahlen des Systems) ist natürlich in Wirklichkeit durch die im Schalenmodell vernachlässigte *Restwechselwirkung*

$$V_R = \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i<j)}}^{A} v(i,j) - \sum_{i=1}^{A} V(i) \tag{I.33}$$

aufgehoben.

Im Rahmen des Schalenmodells kann man sich mit drei experimentell gefundenen *Kopplungsregeln* behelfen, die die Eigenschaften der Grundzustände angeben:

a) gg-Kerne haben ausnahmslos Gesamtspin $I=0$ und gerade Parität.

b) In ungeraden Kernen werden die Eigenschaften des Grundzustandes allein durch den in ungerader Anzahl vorhandenen Nukleonentyp bestimmt.

c) In ungeraden Kernen koppeln sich die Nukleonen des in ungerader Anzahl vorhandenen Typs normalerweise so, daß der Gesamtdrehimpuls I gleich dem j-Wert des unvollständig gefüllten Niveaus ist *(Normale Grundzustandskopplung).* Bei leichten Kernen kommt auch $I=j-1$ vor. Für Massenbereiche weit weg von abgeschlossenen Schalen führt die Annahme kugelsymmetrischer Kerne zu falschen Vorhersagen ([He 61], S. 546ff.). Vgl. auch Kapitel III).

Man hat diese Kopplungsregeln durch *Konfigurationsmischungsrechnungen* unter Benutzung einfacher Ansätze für die Restwechselwirkung V_R begründen können. Hierbei wird V_R in einem Teilraum der Schalenmodellzustände diagonalisiert (Maria Goeppert-Mayer [Ma 50], A. de Shalit [Sh 53]). Insbesondere ergibt sich Regel a), sofern man nur kurz-

reichweitige anziehende Kräfte benutzt. Die Regeln b) und c) entsprechen der bereits erwähnten Rumpfnäherung des Schalenmodells. Auf ein Modell, das in engem Zusammenhang mit Regel a) steht, werden wir in Kap. VII sehr ausführlich eingehen.

6. Experimenteller Nachweis der Schalenstruktur

Neben den Erfolgen des Schalenmodells bei der Erklärung der magischen Zahlen und der Grundzustandsspins erhebt sich vor allem die Frage nach einer direkten experimentellen Evidenz von Einteilchenniveaus. Es erweist sich, daß man insbesondere bei *direkten* Kernreaktionen die Schalenstruktur im Wirkungsquerschnitt deutlich sieht. Als Beispiel wollen wir eine (p, 2p)-Reaktion untersuchen, bei der im beschossenen Kern ein Proton-Loch erzeugt wird. Ein *direkter* (p, 2p)-Prozeß liegt dann vor, wenn die Energie des einfallenden Protons so hoch ist, daß es mit großer Wahrscheinlichkeit innerhalb des Kerns nur einmal mit einem Proton zusammenstößt und beide dann ohne weitere Wechselwirkung mit den übrigen Nukleonen den Kern verlassen (Fig. 9a).

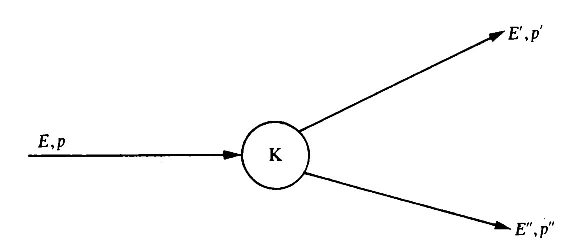


Fig. 9a (p, 2p)-Reaktion (schematisch).

Unter der Annahme, daß das herausgeschlagene Proton sich in einem Schalenmodellniveau befand (Fig. 9b), folgt für die Bindungsenergie E (der Rückstoß sei vernachlässigt):

$$E_B = E - E' - E''. \tag{I.34}$$

Trägt man den Wirkungsquerschnitt als Funktion von $E - E' - E''$ auf, so dürften nach dem Schalenmodell nur an den diskreten Werten E_B Resonanzen auftreten (Fig. 9c).

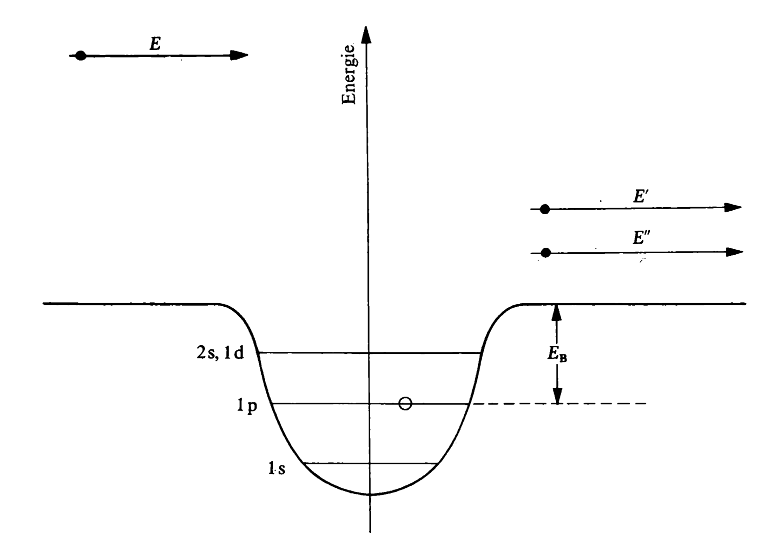


Fig. 9b (p, 2p)-Reaktion im Schalenmodell.

In Wirklichkeit sind diese Resonanzen durch den Einfluß der Restwechselwirkung verbreitert, wie beispielsweise das Experiment $O^{16}(p,2p)N^{15}$ zeigt (Fig. 10). Nichtsdestoweniger sind deutlich das $(\pi 1 s\frac{1}{2})$- und die durch die starke Spin-Bahn-Kopplung aufgespaltenen $(\pi 1 p\frac{3}{2})$- bzw. $(\pi 1 p\frac{1}{2})$-Niveaus zu erkennen.

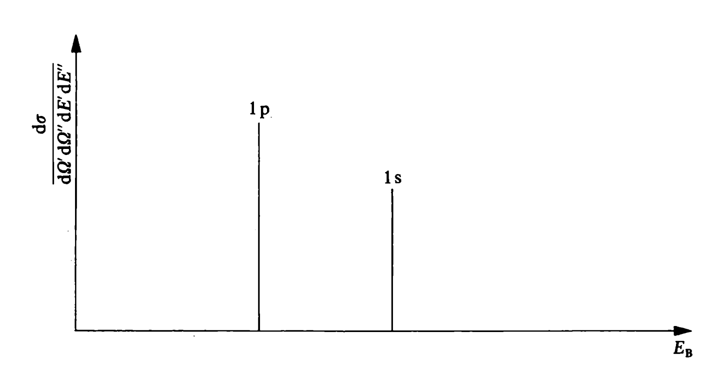


Fig. 9c (p, 2p)-Wirkungsquerschnitt nach dem Schalenmodell.

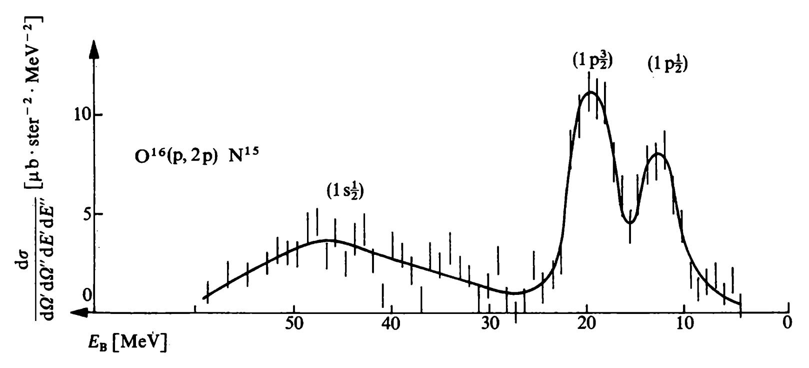


Fig. 10 Experimenteller (p,2p)-Wirkungsquerschnitt bei O^{16} (nach Maris et al. [Ma 58]).

Auf ähnliche Weise kann man mit *stripping*- bzw. *pick up*-Reaktionen, wie z. B. (d,p) bzw. (p,d), ein Neutron in ein unbesetztes Niveau bringen bzw. ein Neutron-Loch erzeugen (Mukherjee und Cohen, [MC 62]). In Fig. 11 werden die in [MC 62] angegebenen Neutronen-Niveaus in Pb^{208} mit Rechnungen von Blomquist und Wahlborn [BW 60] ver-

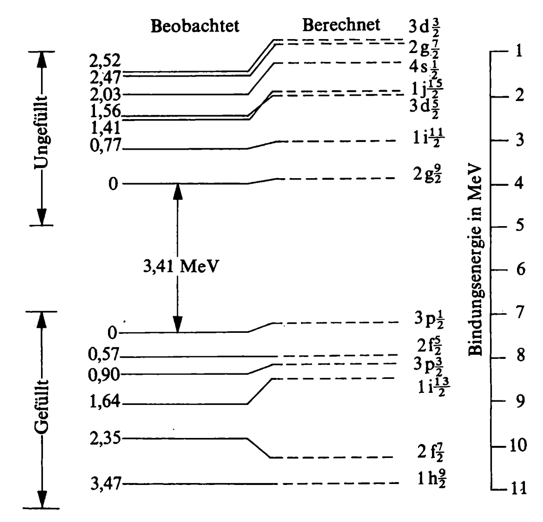


Fig. 11 Vergleich von gemessenen und berechneten Neutronenniveaus in Pb^{208}.

glichen, in denen ein Woods-Saxon-Potential, eine Spin-Bahn-Kraft der Form

$$f(r)=\lambda \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V^{\mathrm{W.S.}}}{\mathrm{d}r} \tag{I.35}$$

und das Coulombpotential einer homogenen geladenen Kugel benutzt werden.

7. *Der Isospinformalismus*

Rechenregeln. In unseren bisherigen Betrachtungen haben wir die Protonen bezüglich der Neutronen als unterscheidbar behandelt. Bereits der Begriff Nukleon deutete jedoch darauf hin, daß Protonen und Neutronen für viele Fragestellungen als äquivalent zu betrachten sind. Diesem Sachverhalt kann man durch Einführung einer neuen Quantenzahl, dem *Isospin*, eine mathematische Struktur geben (Wigner [Wi 37]).

Hierzu faßt man Proton und Neutron als zwei Zustände eines einzigen Elementarteilchens, des Nukleons auf, die als Basisvektoren $\pi=\binom{1}{0}$ und $\nu=\binom{0}{1}$ einen zweidimensionalen Raum aufspannen.

Definiert man einen Operator t_3 in diesem Raum

$$t_3=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \tag{I.36}$$

so sind π und ν Eigenzustände zu t_3 mit den Eigenwerten $\vartheta_3=\pm\frac{1}{2}$:

$$t_3\,\nu=-\tfrac{1}{2}\nu, \tag{I.37}$$

$$t_3\pi=\ \tfrac{1}{2}\pi. \tag{I.38}$$

Zwei weitere Operatoren t_+ und t_-

$$\begin{aligned} t_+ &= \begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}+\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=t_1+\mathrm{i}t_2,\\ t_- &= \begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}-\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=t_1-\mathrm{i}t_2 \end{aligned} \tag{I.39}$$

haben die Eigenschaften von Auf- bzw. Absteigeoperatoren

$$t_+\,\nu=\pi,\quad t_-\,\nu=0, \tag{I.41}$$

$$t_+\pi=0,\quad t_-\pi=\nu \tag{I.42}$$

und verwandeln so ein Neutron in ein Proton bzw. umgekehrt.

Die so definierten Operatoren t_1, t_2, t_3 sind bekanntlich die kleinste irreduzible Darstellung der Drehimpulsalgebra und bilden zusammen mit der Einsmatrix E_2 die Basiselemente des Rings der zweidimensionalen Matrizen. Sie heißen auch Paulimatrizen. Analog zum Spin kann man einen Isospinvektor-Operator bilden:

$$\boldsymbol{t}=\{t_1,t_2,t_3\}. \tag{I.43}$$

Aus (I.43) folgt für den Betrag von $\boldsymbol{t}$:

$$\boldsymbol{t}^2=t_1^2+t_2^2+t_3^2=\tfrac{3}{4}=\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1). \tag{I.44}$$

Proton und Neutron bilden also ein Isospindublett mit Gesamtisospin $\frac{1}{2}$. Man kann die Gesamtwellenfunktion eines Nukleons durch eine weitere Quantenzahl ϑ_3 kennzeichnen, die die Ladung Q des Nukleons bestimmt:

$$Q=\tfrac{1}{2}+\vartheta_3. \tag{I.45}$$

Ganz analog zum Drehimpuls definieren wir den Gesamtisospin eines Systems von N Nukleonen

$$\boldsymbol{T}=\sum_{i=1}^{A}\boldsymbol{t}^{(i)} \tag{I.46}$$

und seine 3-Komponente

$$T_3=\sum_{i=1}^{A}t_3^{(i)}. \tag{I.47}$$

Da dieselbe Algebra wie beim Drehimpuls vorliegt, sind alle Rechenvorschriften für die Kopplung von Isospins dieselben. Der Eigenwert der 3-Komponente des Gesamtisospins ist eine Maßzahl für den Neutronenexzeß des Kerns:

$$\begin{aligned} T_3\,\Psi(1\ldots A)&=\{(-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}-\cdots-\tfrac{1}{2})_N+(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}+\cdots+\tfrac{1}{2})_Z\}\,\Psi(1,\ldots,A)\\ &=\tfrac{1}{2}(Z-N)\,\Psi(1,\ldots,A)=\Theta_3\,\Psi(1,\ldots,A). \end{aligned} \tag{I.48}$$

Der Betrag dieses Eigenwerts ist also gleich dem Betrag des halben Neutronenexzesses. Damit ist Θ_3 für jeden Kern festgelegt, und der Eigenwert Θ von T kann die Werte annehmen:

$$|\Theta_3|\leq\Theta\leq\frac{A}{2}. \tag{I.49}$$

Zweckmäßigkeit des Formalismus. Der Begriff des Isospins ist aus zwei Gründen für die Kernphysik von Vorteil:

a) Der Gesamtisospin vertauscht, abgesehen von Coulombkräften, mit dem Hamiltonoperator des Kerns (ausführliche Diskussion siehe Kapitel IV), d.h. man kann jedem Kernzustand eine „gute“ Gesamtisospinquantenzahl Θ zuordnen.

b) Das Pauliprinzip kann im Kern geschlossener formuliert werden, indem man unter Einführung der Isospinquantenzahlen fordert, daß die A-Teilchengesamtwellenfunktion total antisymmetrisch bei Vertauschung von *Nukleonen* ist.

Aus b) folgt, daß die Symmetrie der Isospinfunktion den Bindungszustand des Systems beeinflußt, da sie durch das Pauliprinzip mit der Symmetrie der Ortsfunktion verknüpft ist. Bei anziehenden Kräften liegen aber die Niveaus von im Ortsraum symmetrischen Funktionen tiefer als die von antisymmetrischen. Im allgemeinen gilt für den Grundzustand:

$$\Theta = |\Theta_3|. \qquad \text{(I.50)}$$

An einem einfachen Beispiel sei die Zuordnung eines bestimmten Gesamtisospins für einzelne stationäre Zustände erläutert. Hierzu betrachten wir drei isobare Kerne:

$${}_6C_4^{10},\ {}_5B_5^{10},\ {}_4Be_6^{10}.$$

Die 3-Komponente des Gesamtisospins hat für die drei Kerne die Werte:

$$\begin{aligned} \Theta_3^{(C)} &= -1, \\ \Theta_3^{(B)} &= \ \ 0, \\ \Theta_3^{(Be)} &= \ \ 1. \end{aligned} \qquad \text{(I.51)}$$

Der Gesamtisospin Θ kann also die Werte annehmen:

$$\begin{aligned} &C: \quad 1 \leq \Theta \leq 5, \\ &B: \quad 0 \leq \Theta \leq 5, \\ &Be: \quad 1 \leq \Theta \leq 5. \end{aligned} \qquad \text{(I.52)}$$

Treten in den Anregungsspektren der drei Kerne jeweils bei etwa denselben Energien (vom Energienullpunkt aus gemessen) Zustände auf, so wird man diese als die drei Mitglieder eines Isospintripletts $\Theta = 1$ identifizieren, die sich nur in den 3-Komponenten $-1, 0, 1$ unterscheiden, solange man von Coulombeffekten absieht, die zu kleinen Energieverschiebungen führen. Zustände, die nur beim Bor auftreten (insbesondere der Bor-Grundzustand) sind Isospinsinguletts mit $\Theta = 0$.

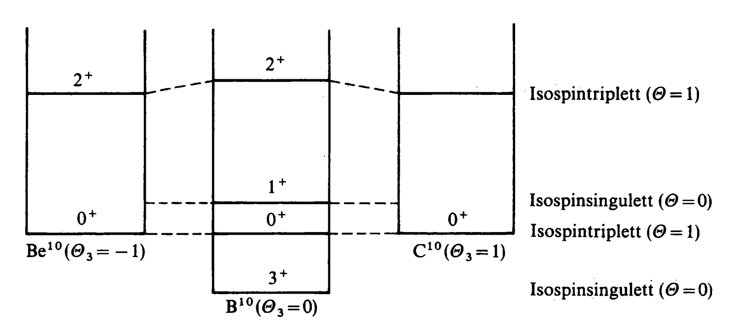


Fig. 12 Isospintripletts und -singuletts in den Anregungsspektren von Isobaren ([Sc 60], S. 129).

Durch Reaktionen, bei denen der Gesamtisospin erhalten bleibt (z.B. $B^{10}(d,d')B^{10*}$), kann man diese Zuordnungen noch untermauern.

Da wir in keiner Weise auf Detailfragen eingehen können, verweisen wir auf das Buch „Der Isospin von Atomkernen" [Sc 60]. Allerdings enthält [Sc 60] noch nicht die Diskussion der Analogresonanzen, die die Brauchbarkeit des Isospinbegriffs bei schweren Kernen in einem neuen Licht erscheinen lassen (vgl. z.B. [LS 62]).

II. MULTIPOLMOMENTE UND MULTIPOLSTRAHLUNG IM SCHALENMODELL

1. Allgemeines

Sowohl theoretisch wie experimentell stellt die Wechselwirkung des Atomkerns mit äußeren elektromagnetischen Feldern ein relativ einfach zugängliches Gebiet dar. Unser Vergleich zwischen Schalenmodell und Experiment soll sich deshalb auf dieses Beispiel beschränken (insbesondere soll nicht auf den β-Zerfall eingegangen werden), und wir werden auch in späteren Kapiteln immer wieder hierauf zurückkommen.

Wegen ihrer Wichtigkeit behandeln wir zunächst etwas ausführlicher die Theorie der statischen Multipolmomente sowie der elektromagnetischen Übergangswahrscheinlichkeiten. Benutzt man für die dabei auftretenden Kernwellenfunktionen die Schalenmodellnäherung, dann stellt sich heraus, daß in den Massenbereichen in der Nähe abgeschlossener Schalen bereits die in Kapitel I besprochene Rumpfnäherung des sphärischen Einteilchenmodells (SEM) brauchbare Ergebnisse liefert, da in diesen Bereichen die unabhängige Bewegung der *Leuchtnukleonen* im mittleren kugelsymmetrischen Potential des zum Drehimpuls $I=0$ gekoppelten Rumpfes am besten realisiert ist.

Für abgeschlossene Schalen und weit weg davon reicht das Schalenmodell selbst zum qualitativen Verständnis der Momente und Übergangswahrscheinlichkeiten nicht aus und muß durch die geeignete Mitnahme der Restwechselwirkung ergänzt werden, was uns in einer Reihe der folgenden Kapitel beschäftigen wird.

2. Statische Multipolmomente

Allgemeine Form. Befindet sich der Kern in einem äußeren statischen elektromagnetischen Feld (gekennzeichnet durch das elektrische Potential Φ und das Magnetfeld $\boldsymbol{B}$), so hat der Hamiltonoperator die bekannte Gestalt

$$H=H_0+\sum_{i=1}^{A}\left[e\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2}\Phi(\boldsymbol{r}_i)-\boldsymbol{\mu}_i\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_i)\right], \qquad \text{(II.1)}$$

wobei

$$H_0 = H_K + H_F, \quad \boldsymbol{\tau}^{(i)} \equiv \{\tau_1^{(i)}, \tau_2^{(i)}, \tau_3^{(i)}\} = 2\boldsymbol{t}^{(i)}. \tag{II.2}$$

H_K ist dabei der Hamiltonoperator des Kerns und lautet in Schalenmodellnäherung:

$$H_K = \sum_{i=1}^{A} h_i. \tag{II.3}$$

H_F ist der Hamiltonoperator des Feldes:

$$H_F = \frac{1}{8\pi}\int [\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{r})]\, d^3 r = \text{const.} \tag{II.4}$$

Die Magnetisierung $\boldsymbol{\mu}$ besitzt zwei Anteile $\boldsymbol{\mu}^{(S)}$ und $\boldsymbol{\mu}^{(B)}$, die vom Spin der Nukleonen bzw. der Bahnbewegung der Protonen herrühren:

$$\boldsymbol{\mu}_i^{(S)} = \mu_K\left(\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2} g_p + \frac{1-\tau_3^{(i)}}{2} g_n\right) \boldsymbol{s}_i, \quad \mu_K = \frac{e\hbar}{2mc} \tag{II.5a}$$

(der Faktor $\hbar$ ist hier aus der Definition des Spins $\boldsymbol{s}$ herausgezogen),

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_i) = c\,\boldsymbol{\nabla}_i \times \boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i). \tag{II.5b}$$

Mit

$$H_0(1,\ldots,A)\,\Psi(1,\ldots,A) = E\,\Psi(1,\ldots,A) \tag{II.6}$$

lautet die Energieverschiebung ΔE eines Zustands $|\Psi\rangle$ infolge der Wechselwirkung des Kerns mit dem äußeren Feld in 1. störungstheoretischer Näherung:

$$\Delta E = \langle\Psi| \sum_{i=1}^{A} \left[e\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2}\,\Phi(\boldsymbol{r}_i) - \boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_i)\right] |\Psi\rangle. \tag{II.7}$$

Diese Näherung reicht aus, da die Kopplungskonstante der elektromagnetischen Wechselwirkung klein gegen die der Kernkräfte ist.

Für das äußere Feld am Kernort gelten die homogenen Maxwellgleichungen, da die Feldquellen weit vom Kernort entfernt liegen sollen:

$$\Delta\Phi(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{II.8a}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{II.8b}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{II.8c}$$

Wegen (II.8b) läßt sich $\boldsymbol{B}$ als Gradient schreiben:

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\,\Xi(\boldsymbol{r}), \tag{II.8d}$$

$$\Delta\Xi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{II.8e}$$

In Kugelkoordinaten lauten die allgemeinsten nichtsingulären Lösungen von (II.8a) und (II.8e):

$$\Phi(\boldsymbol{r})=\sum_{\lambda\mu} a_{\lambda\mu} r^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega), \tag{II.9a}$$

$$\Xi(\boldsymbol{r})=\sum_{\lambda\mu} b_{\lambda\mu} r^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega). \tag{II.9b}$$

($Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega)$ sind Kugelflächenfunktionen). Einsetzen von (II.9a,b) in Gleichung (II.7) liefert

$$\Delta E=\sum_{\lambda\mu}[a_{\lambda\mu} Q_{\lambda\mu}+b_{\lambda\mu} M_{\lambda\mu}], \tag{II.10}$$

wobei

$$Q_{\lambda\mu}\equiv\langle\Psi|\,\hat{Q}_{\lambda\mu}|\Psi\rangle=\langle\Psi|\sum_{i=1}^{A} e\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2} r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)|\Psi\rangle, \tag{II.11a}$$

$$M_{\lambda\mu}\equiv\langle\Psi|\hat{M}_{\lambda\mu}|\Psi\rangle=\langle\Psi|\sum_{i=1}^{A} \nabla_i[r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)]\cdot\boldsymbol{\mu}_i|\Psi\rangle \tag{II.11b}$$

$Q_{\lambda\mu}$ heißt elektrisches, $M_{\lambda\mu}$ magnetisches 2^{λ}-Pol-Moment. In Gleichung (II.11b) führt der Bahnanteil $\boldsymbol{\mu}^{(B)}$ der Magnetisierung $\boldsymbol{\mu}$ zu dem Beitrag:

$$M_{\lambda\mu}^{(B)} = -\frac{1}{c(\lambda+1)}\langle\Psi|\sum_{i=1}^{A} r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)\nabla_i\cdot[\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_i)]|\Psi\rangle. \tag{II.12}$$

Dies werde kurz durch Zurückrechnen von (II.12) auf die Form (II.11b) gezeigt:

$$\begin{aligned} M_{\lambda\mu}^{(B)(i)} &= -\frac{1}{\lambda+1}\langle\Psi|r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)\nabla_i\cdot\{\boldsymbol{r}_i\times[\nabla_i\times\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)]\}|\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{\lambda+1}\langle\Psi|\{\nabla_i[r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)]\}\cdot \\ &\quad\cdot[\nabla_i(\boldsymbol{r}_i\cdot\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i))-\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)-(\boldsymbol{r}_i\cdot\nabla_i)\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)]|\Psi\rangle. \end{aligned} \tag{II.13}$$

Mit $\Delta r^{\lambda} Y_{\mu}^{\lambda}(\Omega)=0$ folgt:

$$\begin{aligned} M_{\lambda\mu}^{(B)(i)} &= \frac{1}{\lambda+1}\langle\Psi|r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)\nabla_i\cdot\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)|\Psi\rangle \\ &\quad-\frac{1}{\lambda+1}\langle\Psi|[\nabla_i(r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i))]\cdot[r_i\frac{\partial}{\partial r_i}\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)]|\Psi\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\lambda+1}-\frac{\lambda+2}{\lambda+1}\right)\langle\Psi|r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i)\nabla_i\cdot\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|[\nabla_i(r_i^{\lambda} Y_{\lambda}^{\mu}(\Omega_i))]\cdot\boldsymbol{\mu}^{(B)}(\boldsymbol{r}_i)|\Psi\rangle, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \tag{II.14}$$

Insgesamt erhalten wir mit dem Stromoperator ([Da 65], S. 588)

$$j(\boldsymbol{r}_i) \equiv \frac{e\hbar}{mi}\nabla_i \tag{II.15}$$

unter Benutzung von (II.5 b), (II.11 b) und (II.12):

$$M_{\lambda\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\langle \Psi | \sum_{i=1}^{A}\left\{[\nabla_i(r_i^\lambda Y_\lambda^\mu(\Omega_i))]\cdot\left[s_i\left(\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2}g_p + \frac{1-\tau_3^{(i)}}{2}g_n\right) + \frac{2}{\lambda+1}\,\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2}\,l_i\right]\right\}|\Psi\rangle . \tag{II.16}$$

$\hbar l_i$ ist hierbei der Bahndrehimpuls des i-ten Protons, g_p und g_n sind die g-Faktoren für freie Protonen bzw. Neutronen ($g_p = 5{,}59$, $g_n = -3{,}83$).

Wir diskutieren zunächst die Auswahlregeln, die für $Q_{\lambda\mu}$ und $M_{\lambda\mu}$ gelten, weil sie unabhängig von der speziellen Form von $|\Psi\rangle$ sind. Da die starke und die elektromagnetische Wechselwirkung die Parität nicht verletzen, kann $|\Psi\rangle$ als Eigenfunktion zum Paritätsoperator gewählt werden. Andererseits haben die Multipoloperatoren $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ und $\hat{M}_{\lambda\mu}$ die Parität $(-1)^\lambda$ bzw. $(-1)^{\lambda+1}$, so daß mit (II.11 a, b) folgt:

$$Q_{\lambda\mu} = 0 \quad \text{für} \quad \lambda = 1,3,5,\ldots, \tag{II.17 a}$$

$$M_{\lambda\mu} = 0 \quad \text{für} \quad \lambda = 0,2,4,\ldots. \tag{II.17 b}$$

Charakterisiert man die Wellenfunktionen $|\Psi\rangle$ durch die Eigenwerte I und M des Gesamtdrehimpulses bzw. seiner z-Komponente, so erhält man mit dem Wigner-Eckart-Theorem ([Ed 64], S. 93)

$$Q_{\lambda\mu} = \langle IM|\,\hat{Q}_{\lambda\mu}|IM\rangle \sim c(\lambda II;\mu MM)\langle I\|\,\hat{Q}_\lambda\|I\rangle, \tag{II.18 a}$$

$$M_{\lambda\mu} = \langle IM|\hat{M}_{\lambda\mu}|IM\rangle \sim c(\lambda II;\mu MM)\langle I\|\hat{M}_\lambda\|I\rangle, \tag{II.18 b}$$

d. h.

$$\left.\begin{array}{l} Q_{\lambda\mu} \neq 0 \\ M_{\lambda\mu} \neq 0 \end{array}\right\} \text{nur für} \quad \mu = 0, \quad 0 \leq \lambda \leq 2I. \tag{II.19}$$

Multipolmomente im SEM. Die Ausdrücke (II.11 a) und (II.16) werden durch die Näherung des SEM stark vereinfacht. Da hierbei – wie schon erwähnt – angenommen wird, daß allein das letzte ungerade Nukleon die Kerneigenschaften bestimmt, ergibt sich für einen A-ungeraden Kern aus (II.11 a) mit (II.19):

$$Q_{\lambda 0} = e\langle jlm\vartheta_3|\,r^\lambda Y_\lambda^0(\Omega)\frac{1+\tau_3}{2}\,|jlm\vartheta_3\rangle . \tag{II.20 a}$$

Analog vereinfacht sich (II.16) zu:

$$M_{\lambda 0}=\mu_K\langle jlm\vartheta_3|[\nabla(r^\lambda Y_\lambda^0(\Omega))]\cdot\left[s\left(\frac{1+\tau_3}{2}g_p+\frac{1-\tau_3}{2}g_n\right)+\frac{2}{\lambda+1}\,\frac{1+\tau_3}{2}\,l\right]|jlm\vartheta_3\rangle. \qquad \text{(II.20b)}$$

Da wegen (II.18) die Abhängigkeit der Multipolmomente $Q_{\lambda 0}$, $M_{\lambda 0}$ von der magnetischen Quantenzahl m trivial ist, gibt man üblicherweise $Q_{\lambda 0}$ und $M_{\lambda 0}$ nur für $m=j$ an. Für ein äußeres Neutron verschwindet $Q_{\lambda 0}$.

Magnetisches Dipolmoment. Für $\lambda=1$ folgt aus (II.20b) der Ausdruck für das magnetische Moment in der SEM-Näherung:

$$\mu=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}M_{10}=\mu_K\langle jlm\vartheta_3|s_z\left(\frac{1+\tau_3}{2}g_p+\frac{1-\tau_3}{2}g_n\right)+\frac{1+\tau_3}{2}l_z|jlm\vartheta_3\rangle. \qquad \text{(II.21)}$$

Berechnet man hieraus μ als Funktion von j, so erhält man ([EL 57], S. 253):

$$\frac{\mu(j)}{\mu_K}=\begin{cases} g_l\left(j-\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}g_s & , \text{ für } j=l+\frac{1}{2}, \\ \left[g_l\left(j+\frac{3}{2}\right)-\frac{1}{2}g_s\right]\frac{j}{j+1}, & \text{für } j=l-\frac{1}{2}. \end{cases} \qquad \text{(II.22)}$$

($g_l=1$, $g_s=g_p$ für Protonen; $g_l=0$, $g_s=g_n$ für Neutronen).

Die Funktionen $\mu(j)/\mu_K$ für $j=l\pm\frac{1}{2}$ heißen Schmidt-Linien (Fig. 13 und 14). Obwohl j nur diskrete Werte annehmen kann, ist $\mu(j)/\mu_K$ kontinuierlich aufgetragen. Zum Vergleich sind die experimentellen Werte angegeben.

Wäre die Theorie exakt, müßten alle μ-Werte auf den Linien liegen. Damit wäre jeweils $l=j\pm\frac{1}{2}$ bestimmt. (j stimmt nach Kap. I mit dem Gesamtspin des Kerns überein und ist somit vorgegeben.) Die experimentellen Werte liegen fast ausnahmslos innerhalb der beiden Linien, die meisten können aber zwei Gruppen zugeordnet werden, von denen eine jeweils einer Schmidt-Linie näher liegt als der anderen. Vergleicht man die so gefundenen l-Werte mit denen, die sich aus dem Auffüllen der Schalen (Fig. 7) ergeben, so stimmen die beiden Werte mit wenigen Ausnahmen überein. Das SEM sollte besonders gute Ergebnisse in der Nähe

μ [Kernmagnetonen]

$j = l + \frac{1}{2}$

$j = l - \frac{1}{2}$

Nb^{93} In^{115} Tc^{99} In^{113} V^{51} Sc^{45} Co^{59} Pr^{141} Al^{27} Mn^{55} Eu^{151} Cs^{*131} Re^{187} Sb^{121} Re^{185} J^{127} Bi^{209} Li^{7} Rb^{87} B^{11} Cu^{65} Ga^{71} Cu^{63} Br^{81} Na^{23} Br^{79} Ga^{69} As^{75} H$_3^*$ H^1 F^{19} Tl^{205} Tl^{203} P^{31} Lu^{175} La^{139} Cs^{*137} Cs^{*135} J^{*129} Sb^{123} Cs^{133} Ta^{181} Eu^{153} Rb^{85} Cl^{35} K^{39} Cl^{37} K^{41} Au^{197} Rh^{103} Y^{89} Ag^{107} Ag^{109} N^{15} Ir^{191} Ir^{193}

$j = \frac{1}{2}$ $\frac{3}{2}$ $\frac{5}{2}$ $\frac{7}{2}$ $\frac{9}{2}$

Fig. 13 Magnetische Momente von Z-ungerade Kernen in Abhängigkeit vom Drehimpuls (nach [MJ 55]).

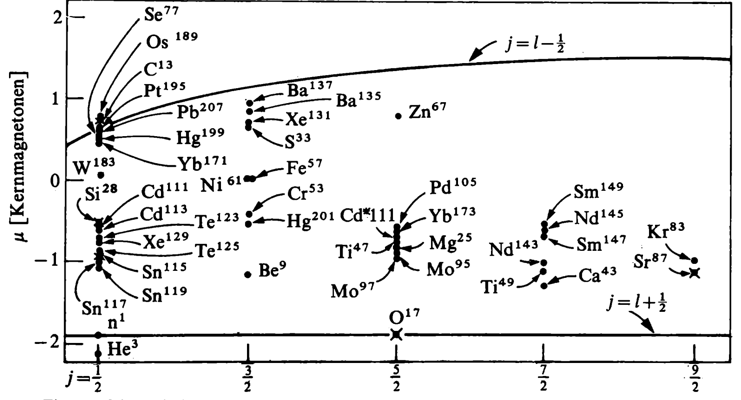


Fig. 14 Magnetische Momente von N-ungerade Kernen in Abhängigkeit vom Drehimpuls (nach [MJ 55]).

abgeschlossener Schalen liefern; in der Tat findet man sehr gute Übereinstimmung z. B. für N^{15}, O^{17}, K^{38}, K^{41} und Pb^{207}.

Elektrisches Quadrupolmoment. Aus (II.20a) folgt für das Quadrupolmoment im SEM:

$$Q_0 = \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\, Q_{20} = e\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\, \langle jlj | r^2\, Y_2^0(\Omega) | jlj \rangle . \qquad \text{(II.23)}$$

Analog zum magnetischen Moment erhält man für $Q_0(j)$ ([EL 57], S. 255):

$$Q_0 = -e\langle r^2 \rangle \frac{2j-1}{2j+2}, \quad \text{für} \quad j = l \pm \frac{1}{2}. \qquad \text{(II.24)}$$

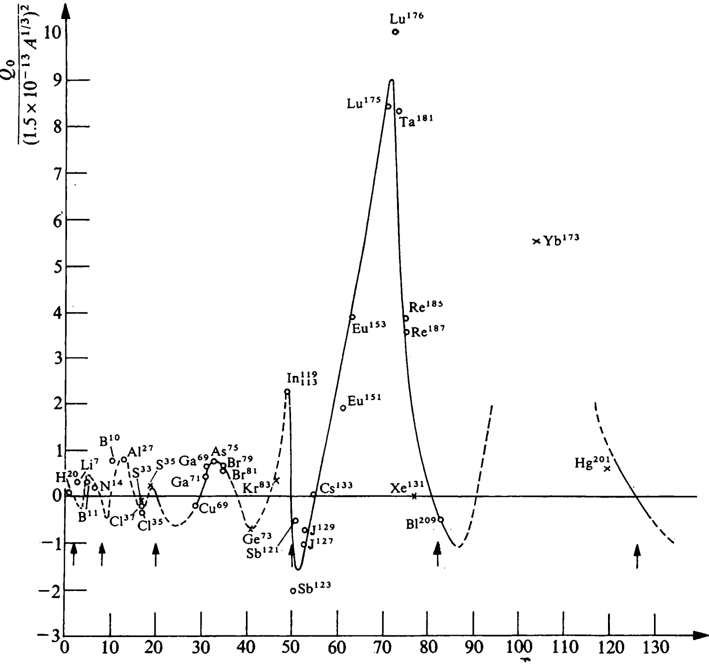


Fig. 15 Quadrupolmomente von gu-, ug- und uu-Kernen dividiert durch das Quadrat des Kernradius $R = 1{,}5 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3}$. Die Quadrupolmomente von Kernen mit ungerader Protonen- und gerader Neutronenzahl sowie die von Kernen mit ungerader Protonen- und ungerader Neutronenzahl sind als Kreise über der Protonenzahl aufgetragen. Die Quadrupolmomente von Kernen mit ungerader Neutronen- und gerader Protonenzahl sind als Kreuze über der Neutronenzahl aufgetragen. Die Pfeile geben Schalenabschlüsse an. (Entnommen aus [To 49]).

$\langle r^2\rangle$ ist hierbei der mittlere quadratische Radius eines Teilchens im Zustand $|jlm\rangle$. Für $j>\frac{1}{2}$ ergeben sich alle Quadrupolmomente negativ. Experimentell zeigt sich jedoch, daß fast immer $Q>0$ gilt und daß die Größenordnung von Q nur in nächster Nähe der magischen Zahlen (z.B. ${}_{59}\mathrm{Pr}^{141}_{82}$ und ${}_{83}\mathrm{Bi}^{209}_{126}$) in etwa durch (II.23) wiedergegeben wird. Die gemessenen Werte von Q sind bei schwereren Kernen zwischen abgeschlossenen Schalen bis zu zwei Größenordnungen größer (Fig. 15). Außerdem haben auch Kerne mit einem ungeraden Neutron betächtliche Quadrupolmomente, die sich im SEM zu Null ergäben. Auf die Tatsache, daß gerade die Quadrupolmomente für Kerne mit Massenzahlen zwischen abgeschlossenen Schalen so sehr von den SEM-Werten abweichen, werden wir im folgenden Kapitel bei der Behandlung der Kerndeformationen näher eingehen.

3. *Multipolübergänge*

Störungsrechnung. Um ein System, bestehend aus einem Kern und einem zeitlich veränderlichen äußeren elektromagnetischen Feld zu beschreiben, rechnet man zweckmäßig mit Coulombeichung ($\operatorname{div} A=0$, $\Phi=0$). Der Hamiltonoperator für dieses System lautet dann:

$$H=H_\mathrm{K}+H_\mathrm{F}+H_\mathrm{KF}, \tag{II.25}$$

$$\begin{aligned} H_\mathrm{F} &= \frac{1}{8\pi}\int [\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{r},t)+\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{r},t)]\,\mathrm{d}^3 r \\ &= \frac{1}{8\pi}\int\left[\left(\frac{1}{c}\,\frac{\partial A(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right)^2+(\nabla\times A(\boldsymbol{r},t))^2\right]\mathrm{d}^3 r, \end{aligned} \tag{II.26}$$

$$H_\mathrm{KF}= -\sum_{i=1}^{A}\left\{\frac{e}{mc}A(\boldsymbol{r}_i,t)\cdot\boldsymbol{p}_i\,\frac{1+\tau_3^{(i)}}{2}+\boldsymbol{\mu}_i\cdot[\nabla_i\times A(\boldsymbol{r}_i,t)]\right\}. \tag{II.27}$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\mu}_i=\boldsymbol{\mu}_i^{(s)}$ zu setzen, da der Bahnanteil bereits im ersten Term von (II.27) enthalten ist. Weiter ist der Term $\sim A^2$ vernachlässigt worden, da er in der Kopplungskonstanten um eine Ordnung kleiner ist als die übrigen.

In 1. Ordnung Diracscher Störungstheorie ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit P_ae zwischen einem Anfangszustand $|\Psi_\mathrm{a}\rangle$ und Endzuständen $|\Psi_\mathrm{e}\rangle$ mit

$$(H_\mathrm{K}+H_\mathrm{F})|\Psi_{\mathrm{a,e}}\rangle=E_{\mathrm{a,e}}|\Psi_{\mathrm{a,e}}\rangle \tag{II.28}$$

zu ([Me 61], S. 736):

$$P_{ae} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_e | H_{KF} | \Psi_a \rangle|^2 \rho(E_e). \tag{II.29}$$

$\rho(E_e)$ bedeutet die Zahl der Endzustände pro Energieeinheit; P_{ae} ist an der Stelle $E_a - E_e = E_\gamma$ zu nehmen (Energiesatz), wobei E_γ die Energie des einfallenden bzw. emittierten γ-Quants ist.

Quantisierung des äußeren Feldes und Charakterisierung nach Multipolfeldern. Ausgehend von der Quantennatur des elektromagnetischen Strahlungsfeldes läßt sich H_F in eine quantisierte Form bringen. Ebenso wie andere Teilchen kann man auch Photonen anstatt durch ihre Impulse (freies Photonengas) durch Drehimpulse charakterisieren (man denke sich hierzu das elektromagnetische Feld z. B. in eine ideal leitende Kugel eingesperrt). Wir werden so zu einer Entwicklung von (II.27) bzw. (II.29) nach Multipolen gelangen. (Für eine ausführlichere Ableitung siehe z.B. Davydov [Da 65], S. 578 ff., Edmonds [Ed 64], S. 100 ff., Blatt, Weisskopf [BW 52], S. 584 ff.).

Der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ eines Photons setzt sich zusammen aus Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ und Spin $\boldsymbol{S}$ (Spin des Photons = 1):

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}. \tag{II.30}$$

In Coulombeichung (das Vektorpotential $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ hat wegen $\operatorname{div}\boldsymbol{A} = 0$ nur transversale Anteile) wird das elektromagnetische Feld beschrieben durch:

$$\Delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = 0. \tag{II.31}$$

Unter Ausnutzung der Vertauschungsrelationen

$$[\nabla\times, \boldsymbol{J}] = [\Delta, \boldsymbol{J}^2] = [\Delta, J_z] = 0 \tag{II.32}$$

läßt sich eine Lösung von Gleichung (II.31) in folgender Weise konstruieren. Mit Hilfe von (II.30) schreiben sich die Eigenfunktionen $\boldsymbol{Y}_{ILm}$ zu $\boldsymbol{J}^2$ und J_z, die sogenannten Vektorkugelfunktionen, als

$$\boldsymbol{Y}_{ILm}(\Omega) = \sum_{m_L m_S} C(L\,1\,L;\, m_L m_S m)\, Y_L^{m_L}(\Omega)\, \chi_1^{m_S}, \tag{II.33}$$

wobei χ_1^{-1}, χ_1^0 und χ_1^1 Eigenfunktionen zu $\boldsymbol{S}^2$ und S_z sind, so daß:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 \boldsymbol{Y}_{ILm} &= I(I+1)\boldsymbol{Y}_{ILm}, \\ J_z \boldsymbol{Y}_{ILm} &= m\boldsymbol{Y}_{ILm}. \end{aligned} \tag{II.34}$$

Da wegen (II.33) der Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ eines Photons bei vorgegebenem Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ nur die Werte $I+1$, I, $I-1$ annehmen kann, ergibt sich mit (II.32) folgender Ansatz zur Lösung von (II.31):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}(kIm) = [&A_{I+1}(r)\boldsymbol{Y}_{II+1m}(\Omega) + A_I(r)\boldsymbol{Y}_{IIm}(\Omega) \\ &+ A_{I-1}(r)\boldsymbol{Y}_{II-1m}(\Omega)]\,\mathrm{e}^{-ickt}. \end{aligned} \tag{II.35}$$

(II.35) zerfällt bezüglich der Parität in zwei linear unabhängige Anteile:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}_{\lambda=\mathrm{E}}(kIm) &= A_{I+1}(r)\,\boldsymbol{Y}_{II+1m}(\Omega) + A_{I-1}(r)\boldsymbol{Y}_{II-1m}(\Omega), \\ \boldsymbol{A}_{\lambda=\mathrm{M}}(kIm) &= A_I(r)\,\boldsymbol{Y}_{IIm}(\Omega), \end{aligned} \tag{II.36}$$

mit

$$\begin{aligned} \Pi \boldsymbol{A}_{\mathrm{E}}(kIm) &= (-1)^I \boldsymbol{A}_{\mathrm{E}}(kIm), \\ \Pi \boldsymbol{A}_{\mathrm{M}}(kIm) &= (-1)^{I+1} \boldsymbol{A}_{\mathrm{M}}(kIm). \end{aligned} \tag{II.37}$$

Hierbei bezeichnet man $\boldsymbol{A}_{\mathrm{E}}(kIm)$ als elektrische, $\boldsymbol{A}_{\mathrm{M}}(kIm)$ als magnetische Komponente des elektromagnetischen Feldes. (Aus $\boldsymbol{Y}_{II+1m}$, $\boldsymbol{Y}_{IIm}$ und $\boldsymbol{Y}_{II-1m}$ könnte noch eine dritte linear unabhängige Komponente gebildet werden, die aber longitudinal ist und somit zum elektromagnetischen Feld nichts beiträgt.)

Setzt man $\boldsymbol{A}_{\mathrm{E}}(kIm)$ bzw. $\boldsymbol{A}_{\mathrm{M}}(kIm)$ in (II.31) ein, so folgt, daß die Radialfaktoren $A_L(r)$ in (II.35) sphärischen Besselfunktionen $j_L(kr)$ proportional sind. Aus praktischen Gründen schreiben wir

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}_{\mathrm{M}}(kIm) &= \sqrt{\frac{4\pi\hbar ck}{R}}\, j_I(kr)\,\boldsymbol{Y}_{IIm}(\Omega)\,\mathrm{e}^{-ickt}, \\ \boldsymbol{A}_{\mathrm{E}}(kIm) &= \sqrt{\frac{4\pi\hbar ck}{R}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2I+1}} \left[\sqrt{I}\, j_{I+1}(kr)\,\boldsymbol{Y}_{II+1m}(\Omega) \right.\right. \\ &\qquad \left.\left. - \sqrt{I+1}\, j_{I-1}(kr)\,\boldsymbol{Y}_{II-1m}(\Omega)\right] \right\} \mathrm{e}^{-ickt} \end{aligned} \tag{II.38}$$

wobei R der Radius derjenigen Kugel sei, durch die das elektromagnetische Strahlungsfeld begrenzt wird:

$$j(kR) = 0.$$

Damit ergeben sich folgende Orthogonalitätsrelationen:

$$\int_V \boldsymbol{A}^*_{\lambda'}(k'I'm')\,\boldsymbol{A}_\lambda(kIm)\,\mathrm{d}^3r = \frac{2\pi\hbar c}{k}\,\delta_{\lambda\lambda'}\,\delta_{kk'}\,\delta_{II'}\,\delta_{mm'}. \tag{II.39}$$

Die allgemeinste Lösung $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ von (II.31) lautet somit:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\lambda k} \sum_{Im} [a_\lambda(kIm)\,\boldsymbol{A}_\lambda(kIm) + \text{k.k.}]. \tag{II.40}$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalitätsrelationen für die $A_\lambda(kIm)$ ergibt sich nach Einsetzen von (II.40) in (II.26) für den Hamiltonoperator des Feldes:

$$H_{\mathrm{F}} = \hbar c \sum_{\lambda k} \sum_{Im} k\, a_\lambda(kIm)\, a_\lambda^*(kIm). \qquad \text{(II.41)}$$

Diese Form ist analog dem klassischen harmonischen Oszillator $H_{\mathrm{h.o.}} = \hbar\omega a a^*$. Symmetrisieren wir (II.41) und gehen von den Zahlen a_λ, a_λ^* zu den Operatoren $\hat{a}_\lambda$, $\hat{a}_\lambda^\dagger$ über, indem wir wie beim harmonischen Oszillator für $\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\lambda^\dagger$ folgende Vertauschungsregeln (siehe auch Anhang über 2. Quantisierung) postulieren[1]

$$[\hat{a}_\lambda(kIm), \hat{a}_{\lambda'}(k'I'm')] = [\hat{a}_\lambda^\dagger(kIm), \hat{a}_{\lambda'}^\dagger(k'I'm')] = 0, \qquad \text{(II.42a)}$$

$$[\hat{a}_\lambda(kIm), \hat{a}_{\lambda'}^\dagger(k'I'm')] = \delta_{\lambda\lambda'}\, \delta_{II'}\, \delta_{mm'}\, \delta_{kk'}, \qquad \text{(II.42b)}$$

so schreibt sich (II.41) in der Form

$$H_{\mathrm{F}} = \hbar c \sum_{\lambda k} \sum_{Im} k[\hat{a}_\lambda^\dagger(kIm)\, \hat{a}_\lambda(kIm) + \tfrac{1}{2}], \qquad \text{(II.43)}$$

d. h., die Energie des elektromagnetischen Feldes wird dargestellt als eine Summe entkoppelter Oszillatoren $\hbar c k$. Führt man den Photonenzahloperator

$$\hat{n}_\lambda(kIm) = \hat{a}_\lambda^\dagger(kIm)\, \hat{a}_\lambda(kIm) \qquad \text{(II.44)}$$

ein, so sehen wir, daß $[H_{\mathrm{F}}, \hat{n}_\lambda(kIm)] = 0$; d. h. wir können einen Zustand des Feldes durch die Zahl der Photonen der Sorte $\{\lambda k I m\}$ charakterisieren (Besetzungszahldarstellung):

$$|\varphi_{\mathrm{F}}\rangle = |\ldots n_\lambda(kIm)\ldots\rangle$$

Die Wirkung der Operatoren $\hat{a}_\lambda^\dagger$ (Erzeugungsoperator), $\hat{a}_\lambda$ (Vernichtungsoperator) und $\hat{n}_\lambda$ auf $|\varphi_{\mathrm{F}}\rangle$ lautet:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger|\ldots n_\lambda \ldots\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1}\,|\ldots n_\lambda + 1 \ldots\rangle, \qquad \text{(II.45a)}$$

$$\hat{a}_\lambda|\ldots n_\lambda \ldots\rangle = \sqrt{n_\lambda}\,|\ldots n_\lambda - 1 \ldots\rangle, \qquad \text{(II.45b)}$$

$$\hat{n}_\lambda|\ldots n_\lambda \ldots\rangle = n_\lambda\,|\ldots n_\lambda \ldots\rangle. \qquad \text{(II.45c)}$$

[1] Hinfort wird das Minuszeichen an der Kommutatorklammer weggelassen und folgende Konvention eingeführt:

$$AB + BA \equiv \{A, B\}$$
$$AB - BA \equiv [A, B]$$

Das Vektorpotential $A(r,t)$ drückt sich aus in der Form

$$A(r,t) = \sum_{\lambda k} \sum_{Im} [\hat{a}_\lambda(kIm) A_\lambda(kIm) + \hat{a}_\lambda^\dagger(kIm) A_\lambda^*(kIm)]. \tag{II.46}$$

Wegen $[\hat{n}_\lambda, A(r,t)] \neq 0$ wird die Photonenzahl von der Wechselwirkung H_{KF} nicht erhalten (Absorption und Emission von Photonen):

$$\Psi_a = \Psi_{K,a} |\ldots n_\lambda(kIm)\ldots\rangle \begin{cases} \xrightarrow{\text{Absorption}} \Psi_{K,e} |\ldots n_\lambda(kIm) - 1\ldots\rangle = \Psi_e, \\ \xrightarrow{\text{Emission}} \Psi_{K,e} |\ldots n_\lambda(kIm) + 1\ldots\rangle = \Psi_e. \end{cases} \tag{II.47}$$

Form der Übergangswahrscheinlichkeiten. Die Absorptionswahrscheinlichkeit für ein Photon der Art $\{\lambda k I m\}$ ist nach dem oben Gesagten also proportional

$$|\langle\ldots n_\lambda - 1\ldots| \hat{a}_\lambda^\dagger |\ldots n_\lambda\ldots\rangle|^2 = n_\lambda,$$

die Emissionswahrscheinlichkeit proportional

$$|\langle\ldots n_\lambda + 1\ldots| \hat{a}_\lambda |\ldots n_\lambda\ldots\rangle|^2 = n_\lambda + 1.$$

Die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Photons ist somit auch für $n_\lambda = 0$ von Null verschieden (spontane Emission).

Aus (II.29) erhalten wir damit unter Berücksichtigung der SEM-Näherung für die Emissionswahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} P_{ae}(\lambda k I m) = \frac{2\pi}{\hbar}(n_\lambda + 1) |\langle j_e l_e m_e \vartheta_{3e}| - A_\lambda^*(kIm)\cdot\nabla \frac{e\hbar}{mci}\,\frac{1+\tau_3}{2} \\ - \boldsymbol{\mu}\cdot[\nabla \times A_\lambda^*(kIm)]\, |j_a l_a m_a \vartheta_{3a}\rangle|^2 \rho_e(k). \end{aligned} \tag{II.48}$$

Um aus (II.48) die übliche Form der Übergangsmatrixelemente herleiten zu können, benutzen wir folgende Identitäten (s.z.B. Davydov [Da 63], S. 582ff.):

$$Y_{IIm}(\Omega) = \frac{l}{\sqrt{I(I+1)}}\, Y_I^m(\Omega), \quad l = -\mathrm{i}[r \times \nabla], \tag{II.49a}$$

$$\mathrm{i} A_E(kIm) = k[\nabla \times A_M(kIm)]. \tag{II.49b}$$

Nehmen wir weiter an, daß die Wellenlänge $2\pi/k$ der Strahlung groß gegen die Kernausdehnung ist, so gilt:

$$kR_0 \ll 1 \quad (R_0 = \text{Kernradius} \simeq 5\,\text{fm}). \tag{II.50a}$$

(Für eine Strahlung von 5 MeV ergibt sich : $kR_0 \simeq 0{,}1$). Damit können wir für die sphärische Besselfunktion $j_I(kr)$ ihre asymptotische Form wählen:

$$j_I(kr) \simeq \frac{(kr)^I}{(2I+1)!!}, \quad kr \ll I+1. \tag{II.50b}$$

Ebenso kann auf Grund der Langwellennäherung folgender Term vereinfacht werden (siehe z.B. Stech [St 52]):

$$\nabla \times A_\mathrm{M}(kIm) \sim \nabla \times [j_I l Y_I^m] \equiv \mathrm{i}\left[\nabla\left(1 + r\frac{\partial}{\partial r}\right) - r\Delta\right] j_I Y_I^m. \tag{II.51a}$$

Mit

$$j_I(kr) = \left(\frac{I}{kr} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(kr)}\right) j_{I-1}(kr) \tag{II.51b}$$

und der Wellengleichung

$$(\Delta + k^2) j_I(kr)\, Y_I^m(\Omega) = 0, \tag{II.51c}$$

folgt aus (II.51a):

$$\nabla \times [j_I l Y_I^m] = \mathrm{i}\nabla[(I+1) j_I Y_I^m - kr j_{I+1} Y_I^m] + \mathrm{i} r k^2 j_I Y_I^m. \tag{II.51d}$$

Mit (II.50b) können höhere Potenzen in kr vernachlässigt werden, und man erhält:

$$\nabla \times [j_I l Y_I^m] \simeq \mathrm{i}\,(I+1)\nabla[j_I Y_I^m]. \tag{II.51e}$$

Es soll nun die magnetische Übergangswahrscheinlichkeit für die Emission als Beispiel berechnet werden. Mit (II.38a) ergibt der erste Term in (II.48) sofort:

$$P^1_{\mathrm{ae}}(\mathrm{M}kIm) = \frac{e^2}{m^2c^2}(n_\mathrm{M}+1)\frac{8\pi^2 ck}{R}$$

$$\times \left|\int \varphi_\mathrm{e}^*(r) j_I(kr)\, \boldsymbol{Y}^*_{IIm}(\Omega)\cdot \boldsymbol{p}\,\frac{1+\tau_3}{2}\varphi_\mathrm{a}(r)\,\mathrm{d}^3 r\right|^2 \rho(k). \tag{II.52}$$

Die Dichte $\rho(k)$ gewinnt man aus der Bedingung $j_I(kR)=0$:

$$j_I(kR) \simeq \frac{\sin\left(kR - \frac{I}{2}\pi\right)}{kR}, \text{ für große } R \tag{II.53a}$$

$$k_n R = n\pi + \frac{I}{2}\pi, \tag{II.53b}$$

$$\rho(k) = \frac{1}{\Delta E(k)} = \frac{1}{\hbar c}\,\frac{1}{\Delta k} = \frac{1}{\hbar c}\,\frac{R}{\pi}. \tag{II.53c}$$

Mit (II. 49 a) und (II. 50 b) liefert damit (II. 52):

$$P^1_{ae}(\mathrm{M}\,k\,I\,m) = \frac{e^2}{m^2 c^2}(n_\mathrm{M}+1)\frac{8\pi k^{2I+1}}{\hbar I(I+1)[(2I+1)!!]^2}$$
$$\times \left| \int \varphi^*_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{r}\times\nabla)[r^I\, Y_I^{m*}(\Omega)]\cdot\boldsymbol{p}\,\frac{1+\tau_3}{2}\,\varphi_a(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 r\right|^2. \quad \text{(II. 54)}$$

Unter Benutzung der Beziehung

$$(\boldsymbol{r}\times\nabla)[r^I\, Y_I^m(\Omega)]\cdot\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}[r^I\, Y_I^m(\Omega)]\cdot(\boldsymbol{r}\times\nabla) \quad \text{(II. 55)}$$

und Berechnung auch des 2. Terms von (II. 48), der sich direkt mit (II. 51 e) vereinfachen läßt, erhält man folgenden Ausdruck für die magnetische Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{ae}(\mathrm{M}\,k\,I\,m) = (n_\mathrm{M}+1)\frac{8\pi(I+1)}{\hbar I[(2I+1)!!]^2}\left(\frac{E_\gamma}{\hbar c}\right)^{2I+1} |M_{I\,m}^{(\mathrm{a}\to\mathrm{e})} + M_{Im}^{\prime(\mathrm{a}\to\mathrm{e})}|^2, \quad \text{(II.56 a)}$$

$$M_{Im}^{(\mathrm{a}\to\mathrm{e})} \equiv \langle \mathrm{e}|\hat{M}_{Im}|\mathrm{a}\rangle$$
$$= \frac{e\hbar}{mc}\,\frac{1}{I+1}\int \varphi^*_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})\nabla[r^I\, Y_I^{m*}(\Omega)]\cdot\boldsymbol{l}\,\frac{1+\tau_3}{2}\,\varphi_\mathrm{a}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 r, \quad \text{(II. 56 b)}$$

$$M_{Im}^{\prime(\mathrm{a}\to\mathrm{e})} \equiv \langle \mathrm{e}|\hat{M}'_{Im}|\mathrm{a}\rangle$$
$$= \frac{e\hbar}{2mc}\int \varphi^*_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})\nabla[r^I\, Y_I^{m*}(\Omega)]\cdot\boldsymbol{s}\left(\frac{1+\tau_3}{2}\,g_\mathrm{p} + \frac{1-\tau_3}{2}\,g_\mathrm{n}\right)\varphi_\mathrm{a}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 r. \quad \text{(II. 56 c)}$$

In ähnlicher Weise folgt für die elektrische Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{ae}(\mathrm{E}\,k\,I\,m) = (n_\mathrm{E}+1)\frac{8\pi(I+1)}{\hbar I[(2I+1)!!]^2}\left(\frac{E_\gamma}{\hbar c}\right)^{2I+1} |Q_{Im}^{(\mathrm{a}\to\mathrm{e})} + Q_{I\,m}^{\prime(\mathrm{a}\to\mathrm{e})}|^2, \quad \text{(II.57 a)}$$

$$Q_{Im}^{(\mathrm{a}\to\mathrm{e})} \equiv \langle \mathrm{e}|\hat{Q}_{Im}|\mathrm{a}\rangle = e\int \varphi^*_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})\,r^I\, Y_I^{m*}(\Omega)\frac{1+\tau_3}{2}\,\varphi_\mathrm{a}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 r, \quad \text{(II.57 b)}$$

$$Q'^{(a\to e)}_{Im} \equiv \langle e|\hat{Q}'_{Im}|a\rangle = \frac{ik}{I+1}\frac{e\hbar}{2mc}\int \varphi^*_e(\boldsymbol{r})\nabla[r^I Y^{m*}_I(\Omega)]\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{s})$$
$$\times\left(\frac{1+\tau_3}{2}g_p+\frac{1-\tau_3}{2}g_n\right)\varphi_a(\boldsymbol{r})\,d^3r \qquad \text{(II.57c)}$$

Ein Vergleich mit den statischen Multipolmomenten zeigt, daß die Multipoloperatoren im magnetischen Fall die gleichen sind, sich im elektrischen Fall aber um einen Term unterscheiden, der von der Rückkopplung des magnetischen auf das elektrische Feld herrührt.

Da man, abgesehen von Polarisationsmessungen, im allgemeinen die verschiedenen Einstellungen der Drehimpulse nicht unterscheidet, hat man noch über die Anfangsrichtungen zu mitteln und über die Endrichtung zu summieren. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für einen bestimmten Multipolübergang ergibt sich damit zu:

$$P_{ae}(I) = \frac{1}{2j_a+1}\sum_{m_a m_e}[P_{ae}(\mathrm{E}kIm)+P_{ae}(\mathrm{M}kIm)] = P_{ae}(\mathrm{E}I)+P_{ae}(\mathrm{M}I). \qquad \text{(II.58)}$$

Auswahlregeln. Unabhängig von der Einteilchennäherung ergeben sich aus der Struktur der Übergangsmatrixelemente

$$\langle I_a M_a|\sum_{i=1}^{A}\hat{Q}^{(i)}_{Im}|I_e M_e\rangle,\quad \langle I_a M_a|\sum_{i=1}^{A}\hat{Q}'^{(i)}_{Im}|I_e M_e\rangle,$$
$$\langle I_a M_a|\sum_{i=1}^{A}\hat{M}^{(i)}_{Im}|I_e M_e\rangle,\quad \langle I_a M_a|\sum_{i=1}^{A}\hat{M}'^{(i)}_{Im}|I_e M_e\rangle \qquad \text{(II.59)}$$

(vgl. (II.56b,c), (II.57b,c)) folgende Auswahlregeln für einen Übergang von einem Anfangszustand $|I_a M_a\rangle$ zu einem Endzustand $|I_e M_e\rangle$:

$$|I_a - I_e| \le I \le I_a + I_e, \qquad \text{(II.60a)}$$

$$M_a - M_e = m, \qquad \text{(II.60b)}$$

$$\pi_a \pi_{\lambda Im} \pi_e = 1. \qquad \text{(II.60c)}$$

Hierbei ist $\pi_{\lambda Im}$ die Parität der Multipolstrahlung der Sorte $\{\lambda Im\}$:

$$\pi_{\mathrm{E}Im} = (-1)^I, \qquad \text{(II.61a)}$$

$$\pi_{\mathrm{M}Im} = (-1)^{I+1}. \qquad \text{(II.61b)}$$

Es gibt somit folgende vier Fälle für die niedrigst mögliche Multipolstrahlung (2^I-Polstrahlung):

$$\begin{array}{llll} |I_a - I_e| & \text{geradzahlig,} & \pi_a = \pi_e: & \text{E2, E4,...,} \\ |I_a - I_e| & \text{geradzahlig,} & \pi_a = -\pi_e: & \text{M2, M4,...,} \\ |I_a - I_e| & \text{ungeradzahlig,} & \pi_a = \pi_e: & \text{M1, M3,...,} \\ |I_a - I_e| & \text{ungeradzahlig,} & \pi_a = -\pi_e: & \text{E1, E3,....} \end{array} \qquad \text{(II.62)}$$

Weisskopfabschätzung. Eine sehr grobe Abschätzung von $P_{ae}(\mathrm{E}I)$ und $P_{ae}(\mathrm{M}I)$ wurde von V.F. Weisskopf [We 51] gegeben. Der Beitrag von Q'_{Im} zu $P(\mathrm{E}I)$ ist im allgemeinen sehr klein und kann vernachlässigt werden. Des weiteren kann man die Winkelintegration und die Summation ausführen und erhält, wenn man den von den Clebsch-Gordan-Koeffizienten herrührenden Faktor näherungsweise gleich Eins setzt, für den elektrischen Anteil von (II.58)

$$P_{ae}(\mathrm{E}I) \simeq \frac{8\pi(I+1)}{\hbar I[(2I+1)!!]^2} \left(\frac{E_\gamma}{\hbar c}\right)^{2I+1} \frac{e^2}{4\pi} \langle r^I \rangle_{ae}^2, \qquad \text{(II.63 a)}$$

wobei

$$\langle r^I \rangle_{ae} = \frac{\int_0^\infty r^{I+2} u_e^* u_a \,\mathrm{d}r}{\int_0^\infty u_e^* u_a r^2 \,\mathrm{d}r} \simeq \frac{3}{I+3} R^I. \qquad \text{(II.63 b)}$$

In der letzten Näherung wurde dabei eine über den Kernbereich konstante Radialfunktion $u(r)$ angenommen. Einsetzen von Zahlenwerten liefert für die *Weisskopfabschätzung*

$$P_{ae}(\mathrm{E}I) \simeq \frac{4{,}4(I+1)}{I[2I+1)!!]^2} \left(\frac{3}{I+3}\right)^2 \left(\frac{E_\gamma}{197}\right)^{2I+1} R^{2I} [10^{21}\,\mathrm{sec}^{-1}]; \qquad \text{(II.64)}$$

und ebenso für den magnetischen Anteil von (II.58), wenn man den Spezialfall $I = |j_a - j_e| = |l_a + 1 - l_e|$ betrachtet:

$$P_{ae}(\mathrm{M}I) \simeq \frac{0{,}19(I+1)}{I[(2I+1)!!]^2} \left(\frac{3}{I+2}\right)^2 \left(\frac{E_\gamma}{197}\right)^{2I+1} R^{2I-2} \times \left(\frac{I}{2} g_s - \frac{I}{I+1} g_l\right)^2 [10^{21}\,\mathrm{sec}^{-1}]. \qquad \text{(II.65)}$$

In (II.64) und (II.65) ist dabei E_γ in MeV und R in fm einzusetzen.

An den Gleichungen (II.64) und (II.65) läßt sich sehr gut die Größenordnung der einzelnen Multipolkomponenten vergleichen: Im allgemeinen ist bei den in Frage kommenden Experimenten $E_\gamma \ll 197$, und es nehmen somit die Übergangswahrscheinlichkeiten für höhere Multipolordnungen sehr rasch ab; dies steht im Einklang mit der Erfahrung.

4. *Vergleich mit dem Experiment und Zusammenfassung*

Der Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Werten für die Übergangswahrscheinlichkeiten wird zumeist an den isomeren Zuständen durchgeführt, die bei einer Reihe von Kernen besonders in den Massenbereichen $39 < Z,\ N < 49$; $65 < Z,\ N < 81$; $101 < N < 125$ (Inseln der Isomere) auftreten. Isomere Zustände sind Anregungszustände von Kernen, die infolge der Auswahlregeln (II.60) bis (II.62) nur durch Emission von Strahlung relativ hoher Multipolordnung zerfallen können und somit nach dem oben Gesagten eine sehr lange Lebensdauer haben. Typische Halbwertszeiten τ sind z.B.:

$$Y^{91} : \tau = 51\ \text{min}; \quad Ba^{133} : \tau = 39\ \text{Std.}, \quad Hg^{197} : \tau = 23\ \text{Std.},$$
$$Te^{123} : \tau = 104\ \text{Tage}, \quad Tc^{95} : \tau = 5\ \text{Jahre}.$$

Soll das SEM eine brauchbare Näherung zur Beschreibung des Kerns sein, so sollte es in seinem Rahmen möglich sein, sowohl die Art der jeweiligen Multipolstrahlung zu bestimmen als auch richtige Größenordnungen für die Übergangswahrscheinlichkeiten zu liefern. Betrachten wir die Niveaufolge des Schalenmodells (Fig. 7), so sehen wir, daß bei den Inseln der Isomeren folgende Übergänge vom ersten angeregten Zustand zum Grundzustand auftreten können. (In Klammern ist jeweils der erlaubte Strahlungstyp angegeben.):

$$39 < Z, N < 49: \qquad 1\,g\tfrac{9}{2} \rightarrow \begin{cases} 2\,p\tfrac{1}{2}(\mathrm{M}\,4) \\ 1\,f\tfrac{5}{2}(\mathrm{E}\,3) \end{cases}$$

$$65 < Z, N < 81: \qquad 1\,h\tfrac{11}{2} \rightarrow \begin{cases} 3\,s\tfrac{1}{2}(\mathrm{E}\,5) \\ 2\,d\tfrac{3}{2}(\mathrm{M}\,4) \\ 2\,d\tfrac{5}{2}(\mathrm{E}\,3) \end{cases}$$

$$101 < N < 125: \qquad 1\,i_{\frac{13}{2}} \rightarrow \begin{cases} 3\,p_{\frac{1}{2}}(\mathrm{M}\,6) \\ 3\,p_{\frac{3}{2}}(\mathrm{E}\,5) \\ 2\,f_{\frac{5}{2}}(\mathrm{M}\,4) \\ 2\,f_{\frac{7}{2}}(\mathrm{E}\,3) \end{cases}$$

D. h. es wird in diesen Massenbereichen das häufige Auftreten von Multipolübergängen höherer Ordnung und die damit verbundene lange Lebensdauer der isomeren Zustände befriedigend erklärt.

Weniger günstig ist die quantitative Voraussage der Lebensdauer (Fig. 16, Stech [St 52]). Für eine genauere Diskussion dieser Figur siehe auch Mayer, Jensen ([MJ 55], S. 221).

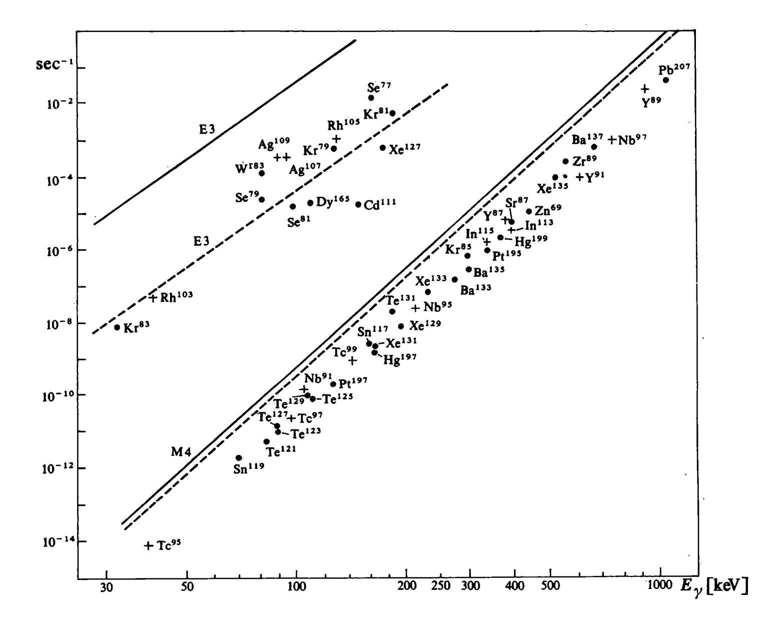


Fig. 16 Energieabhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeit für magnetische 2^4 – und elektrische 2^3-Pol-Strahlung. Die ausgezogenen Linien sind die berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten für Kerne mit einem geraden Proton; die gestrichelt gezeichneten Linien gelten für Kerne mit einem ungeraden Neutron. Die eingezeichneten Punkte (Kreuz für Proton, Punkt für Neutron) sind die experimentell ermittelten Übergangswahrscheinlichkeiten der E 3- und M 4-Isomere.

Die theoretischen Werte sind um einen nahezu konstanten Faktor $\simeq 30$ zu groß, die Energieabhängigkeit wird aber zumindest für die M4-Übergänge sehr gut wiedergegeben und somit der aus dem Schalenmodell gefolgerte Strahlungstyp bestätigt. Weitere Rechnungen (Moszkowski, Lane und Radicati, [Mo 53, LR 54]) zeigen, daß für andere Multipolstrahlungen die Übereinstimmung teilweise noch schlechter ist; insbesondere ergibt sich, daß der E2-Übergang um einen Faktor 100 zu schnell verläuft.

Zusammenfassung. Das SEM bewährt sich ausgezeichnet bei der Vorhersage isomerer Zustände und ihres Übergangstyps. Die Rechnungen ergeben brauchbare Werte für das statische magnetische Dipolmoment und in den meisten Fällen auch für die Übergangswahrscheinlichkeiten, liefern aber völlig falsche Ergebnisse für das statische elektrische Quadrupolmoment und für die E2-Übergangswahrscheinlichkeiten. Wir werden in den Kapiteln III und VII sehen, daß dieses Versagen in engem Zusammenhang mit einer stabilen Deformation des Kerns und mit Kollektivbewegungen der Nukleonen steht.

III. DEFORMATIONEN

1. *Allgemeines*

Die Annahme der näherungsweise unabhängigen Bewegung der Nukleonen eines Kernes in einem von ihnen selbst erzeugten mittleren Potential bildet die wesentliche Grundlage für das Gebäude der modernen Kerntheorie. In ihrer einfachsten Form, dem sphärischen Einteilchenmodell, ist sie allerdings – wie die Diskussion von Kapitel II zeigt – nur in der unmittelbaren Umgebung abgeschlossener Schalen brauchbar. Weit entfernt von den abgeschlossenen Schalen, d. h. für die Massenzahlen $A \simeq 25$(Al, Mg), $150 < A < 190$ (u. a. Lanthaniden) und $A > 220$ (Actiniden), erweist sich eine weitere ad-hoc-Annahme als unerläßlich, die eine stabile Gleichgewichtsdeformation in diesen Bereichen postuliert. Von einer über das Schalenmodell hinausgehenden Begründung solcher Deformationen wird in Kap. VIII noch zu reden sein.

Im folgenden wollen wir zunächst auf experimentelle Ergebnisse Bezug nehmen, die auf eine Gleichgewichtsdeformation hinweisen. Daraufhin besprechen wir das von S. G. Nilsson [Ni 55] entwickelte Schalenmodell für deformierte Kerne *(Nilsson-Modell)* und diskutieren seine Brauchbarkeit. Ein weiterer Abschnitt wird den *kollektiven Rotationen* gewidmet sein, wobei erstmals auch über das Schalenmodell hinausgehende Methoden zur Sprache kommen werden, deren Grundgedanken auf Bohr und Mottelson [BM 53] zurückgehen. Am Ende des Kapitels werden wir wieder einen Vergleich mit dem Experiment anstellen.

2. *Experimentelle Hinweise auf eine stabile Kerndeformation*

Energiespektrum. In den angegebenen Massenzahlbereichen weist das Anregungsspektrum ausgeprägte *Rotationsbanden* auf (vgl. z. B. [Mo 57], S. 485 und Fig. 17), d. h. der Kern kann sich in Anregungszuständen mit Gesamtdrehimpuls I befinden, für die, zumindest im Bereich kleinerer Drehimpulse, folgender charakteristischer Zusammenhang zwischen Energie E_I und I besteht (z. B. für eine Bande, die auf einem Zustand mit Gesamtdrehimpuls I_0 aufbaut):

$$E_I - E_{I_0} = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left[I(I+1) - I_0(I_0+1)\right]. \qquad \text{(III. 1)}$$

Θ ist eine für den Kern charakteristische Größe und wird analog zur klassischen Mechanik als *Trägheitsmoment* des Kerns bezeichnet. In Kapitel IX werden wir auf die Methoden zu seiner Berechnung eingehen. Das durch (III.1) wiedergegebene Niveauschema ist identisch mit dem eines quantenmechanischen Kreisels.

I^π	E_I[keV]
18^+	3761,6
16^+	3147,3
14^+	2563,6
12^+	2013,3
10^+	1503,3
8^+	1041,3
6^+	641,1
4^+	320,6
2^+	100,0
0^+	0

Fig. 17 Rotationsspektrum von Hf^{170}
(Nach Stephens et al. [St 65])

Quadrupolmomente. Wir haben bereits in Kapitel II gesehen, daß ein sphärisches Einteilchenmodell mit starrem Rumpf die gemessenen großen Quadrupolmomente weit weg von abgeschlossenen Schalen in

keiner Weise erklären kann (Fig. 15). Dieser Befund gibt einen Hinweis auf eine stabile Kerndeformation, bei der auch der deformierte Rumpf zum Quadrupolmoment beiträgt.

Man kann leicht klassisch den Zusammenhang zwischen dem Quadrupolmoment Q_0 eines homogen geladenen Rotationsellipsoids der Ladung Ze

$$Q_0 = \tfrac{2}{5} Z e (b^2 - a^2) \qquad \text{(III.2)}$$

und einem Deformationsparameter δ angeben, indem man die Halbachsen a und b durch δ ausdrückt

$$a^2 = \frac{R^2}{1+\frac{2}{3}\delta}, \quad b^2 = \frac{R^2}{1-\frac{4}{3}\delta} \qquad \text{(III.3)}$$

und die Inkompressibilität des Kerns berücksichtigt:

$$\frac{4\pi}{3} a^2 b = \text{const.} = \frac{4\pi}{3} r_0^3. \qquad \text{(III.4)}$$

Einsetzen von (III.3) und (III.4) in (III.2) liefert bis auf Größen der Ordnung δ^3:

$$Q_0 \simeq e \tfrac{4}{5} Z r_0^2 \delta (1 + \tfrac{2}{3}\delta) + O(\delta^3). \qquad \text{(III.5)}$$

Benutzt man diese Formel zur Abschätzung des Deformationsparameters aus experimentellen Daten (Fig. 15), so ergibt sich im Bereich der Lanthaniden

$$\delta \simeq 0{,}25,$$

d. h. eine zigarrenförmige Deformation, während im Bereich $A \gtrsim 25$ auch scheibenförmige Kerne vorkommen.

Wir wollen noch einige Experimente zur Messung von Quadrupolmomenten angeben:

a) Die Hüllenelektronen wechselwirken mit dem Quadrupolfeld des Kerns (Hyperfeinstruktur der Hüllenspektren). Bei dieser Methode wird aber nicht das *innere* Quadrupolmoment Q_0 gemessen, da für die Elektronen infolge der Präzession des Kerns in adiabatischer Näherung ein zeitlich gemitteltes effektives Quadrupolmoment Q wirksam ist ([Da 63], S. 540):

$$Q = \frac{I(2I-1)}{(I+1)(2I+3)} Q_0. \qquad \text{(III.6)}$$

Für $I = 0, \frac{1}{2}$ macht sich das innere Quadrupolmoment spektroskopisch nicht bemerkbar.

b) Q_0 läßt sich auch aus E2-Übergangswahrscheinlichkeiten innerhalb einer Rotationsbande bestimmen ([Da 63], S. 380). Für die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $I+2$ bzw. I ergibt sich z. B.:

$$|Q_{20}^{(I+2\to I)}|^2 = \frac{15(I+2)(I+1)}{32\pi(2I+1)(2I+3)} Q_0^2. \tag{III.7}$$

Auch für $I<1$ läßt sich hiermit Q_0 bestimmen.

Weitere Methoden zur Bestimmung von Q_0 aus der Isotopieverschiebung, der hochenergetischen Streuung von Elektronen und dem μ-Einfang sind in einem Artikel von Temmer zusammengefaßt [Te 58].

Dipolriesenresonanz. Im Kern gibt es kollektive Schwingungszustände, die durch γ-Absorption angeregt werden können (vgl. Kapitel VI). Bei kugelsymmetrischen Kernen gibt es keine bevorzugte Schwingungsrichtung und demzufolge nur eine Anregungsfrequenz, bei Achsialsymmetrie

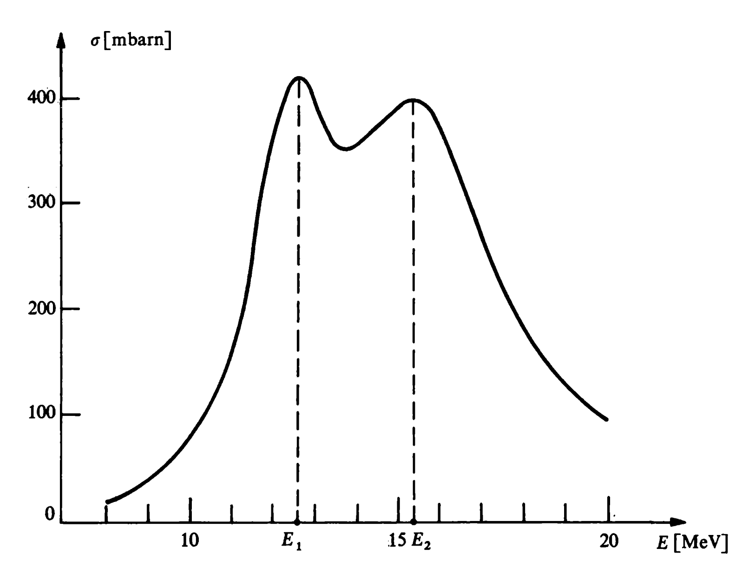


Fig. 18 Dipolabsorption bei deformierten Kernen.

hingegen sind zwei zueinander senkrechte Richtungen ausgezeichnet. So zeigt z. B. der Wirkungsquerschnitt für Dipolabsorption bei der Reaktion $Mg^{24}(\gamma, n)Mg^{23}$ zwei Maxima bei 17,2 und 19 MeV (Fig. 18). Aus der Lage der beiden Maxima kann δ bestimmt werden (Danos [Da 56]):

$$\Delta E = E_1 - E_2 \sim \delta. \qquad \text{(III.8)}$$

Kernspaltung. Die schwersten Kerne zerfallen teils spontan, teils unter Neutronenbeschuß in zwei Bruchstücke vergleichbarer Masse. Dies ist bei Deformation leichter zu verstehen als bei Kugelsymmetrie.

Zusammenfassend kann man sagen, daß eine Vielzahl experimenteller Daten mit der Annahme einer stabilen Kerndeformation verträglich sind.

3. *Formulierung des Nilsson-Modells*

Die Grundidee des Nilsson-Modells besteht in der Annahme, daß das mittlere Potential, in dem sich die Nukleonen in Schalenmodellnäherung unabhängig voneinander bewegen, im allgemeinen eine stabile Deformation aufweisen wird. Als einfachster mathematischer Ansatz bietet sich ein anisotroper harmonischer Oszillator an, der eine Spin-Bahn-Kraft und eine Korrektur des – verglichen mit dem Woods-Saxon-Potential – zu diffusen Kernrandes enthält. Damit lautet der Einteilchenhamiltonoperator:

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta' + \tfrac{1}{2}m[\omega_x^2(x'^2 + y'^2) + \omega_z^2 z'^2] + C\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + D\,\boldsymbol{l}^2 - U_0. \qquad \text{(III.9a)}$$

Den Konstanten C und D gibt man aus Bequemlichkeitsgründen die Form:

$$C = -2\hbar\mathring{\omega}_0\kappa, \quad D = -\hbar\mathring{\omega}_0\kappa\mu. \qquad \text{(III.9b)}$$

C bestimmt die Stärke der Spin-Bahn-Kraft. Der Term $D\boldsymbol{l}^2$ korrigiert die Radialabhängigkeit des Potentials, indem er die Energie von Zuständen mit großem Bahndrehimpuls, in denen sich die Nukleonen vorwiegend am Kernrand aufhalten, absenkt, da die Energie dieser Zustände durch die Oszillatornäherung überschätzt wird. Die Wirkung der Zusatzglieder veranschaulicht Fig. 19 für den Fall $\omega_x = \omega_z$.

Man führt ähnlich wie in (III.3) wieder den Deformationsparameter δ ein:

$$\omega_x^2 = \omega_0^2(1 + \tfrac{2}{3}\delta), \quad \omega_z^2 = \omega_0^2(1 - \tfrac{4}{3}\delta). \qquad \text{(III.10)}$$

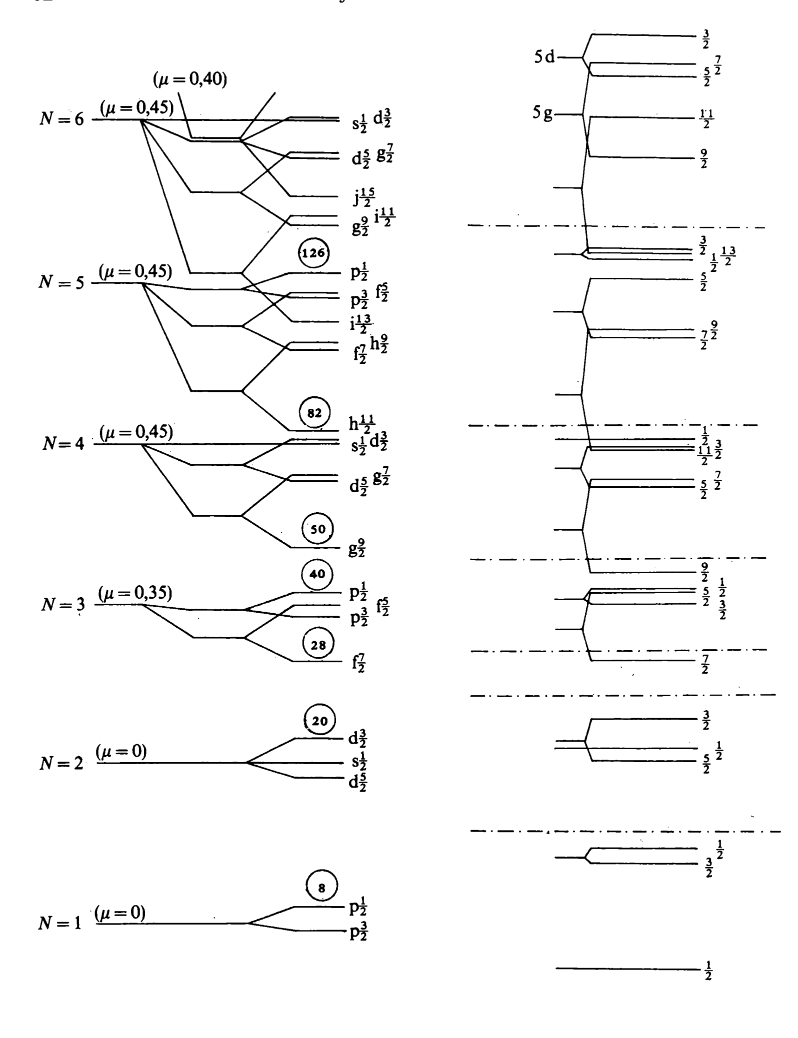


Fig. 19 Vergleich von experimentell bestimmten [Kl 52] Niveauschemata mit Rechnungen [Ni 55] im sphärischen Modell mit Zusatztermen $\sim l^2$ bzw. $\sim l \cdot s$.

Allerdings ist ω_0 von δ nicht unabhängig, da man annehmen kann, daß Flächen gleichen Potentials mit den Flächen gleicher Dichte übereinstimmen (vgl. z. B. [He 61], S. 542) und damit wegen der Inkompressibilität von Kernmaterie gilt:

$$\omega_x^2 \omega_z = \text{const.} = \mathring{\omega}_0^3. \tag{III.11}$$

Dies führt zusammen mit (III.10) zu der Beziehung:

$$\omega_0 = \omega_0(\delta) = \mathring{\omega}_0[(1+\tfrac{2}{3}\delta)(1-\tfrac{4}{3}\delta)]^{-1/6} \simeq \mathring{\omega}_0(1+\tfrac{2}{9}\delta^2). \tag{III.12}$$

Man kann jetzt (III.9a) in eine bequeme Form bringen, wenn man dimensionslose Koordinaten einführt

$$x' = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}\, x; \ldots; \ldots \tag{III.13a}$$

und auf Kugelkoordinaten transformiert.

Mit

$$Y_2^0(\vartheta) = \tfrac{1}{4}\sqrt{5/\pi}(3\cos^2\vartheta - 1) \tag{III.13b}$$

schreibt sich dann der Nilsson-Hamiltonoperator:

$$h = \mathring{H}_0 + H_\delta - \kappa\hbar\mathring{\omega}_0(2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + \mu\boldsymbol{l}^2) = \mathring{H}_0 + \kappa\hbar\mathring{\omega}_0 R \tag{III.14a}$$

mit den Abkürzungen

$$\mathring{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0(\delta)}{2}(-\Delta + r^2), \tag{III.14b}$$

$$H_\delta = -\delta\hbar\omega_0(\delta)\tfrac{4}{3}\sqrt{5/\pi}\, r^2\, Y_2^0(\vartheta). \tag{III.14c}$$

U_0 sei im folgenden weggelassen, da dieser Term nur eine Verschiebung des Energienullpunkts bedeutet.

4. *Bestimmung des Niveauschemas im Nilsson-Modell*

Wahl der Darstellung. Matrixelemente. Zweckmäßigerweise löst man das Eigenwertproblem des Operators h (III.14a) durch Diagonalisation in einer geeigneten Darstellung. Hierfür bietet sich sowohl die Basis des isotropen als auch die des axialsymmetrischen harmonischen Oszillators an. Da jedoch die Auswahlregeln für die auftretenden Operatoren in der Basis der isotropen Eigenfunktionen eine einfachere Gestalt haben, gibt man dieser den Vorzug. In der Arbeit von Nilsson [Ni 55] wird auch die andere Basis diskutiert.

Wir wollen mit den Vertauschungsrelationen

$$[\mathring{H}_0, l^2] = [\mathring{H}_0, l_z] = [\mathring{H}_0, s_z] = 0 \qquad \text{(III.15)}$$

folgende Nomenklatur benutzen:

$$\begin{aligned} \mathring{H}_0 |N l m m_s\rangle &= \hbar\omega_0 (N + \tfrac{3}{2}) |N l m m_s\rangle, \\ l^2 |N l m m_s\rangle &= l(l+1) |N l m m_s\rangle, \\ l_z |N l m m_s\rangle &= m |N l m m_s\rangle, \\ s_z |N l m m_s\rangle &= m_s |N l m m_s\rangle, \end{aligned} \qquad \text{(III.16)}$$

$$N = 2n + l, \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Stellt man $|N l m m_s\rangle$ im Orts- und Spinraum dar, so ergibt sich:

$$\langle r, s | N l m m_s\rangle = A_{nl} r^l e^{-\frac{r^2}{2}} F(-n, l + \tfrac{3}{2}, r^2)\, Y_l^m(\Omega)\, \chi_{\frac{1}{2}}^{m_s}(s). \qquad \text{(III.17)}$$

Hierbei ist $\mathring{H}_0$ gegeben durch (III.14b), l^2, l_z sind das Quadrat bzw. die z-Komponente des Bahndrehimpulses, s_z die z-Komponente zum Spin $\frac{1}{2}$; N, l, m, m_s sind die dazugehörigen und durch (III.16) definierten Quantenzahlen, F ist die konfluente hypergeometrische Funktion und χ die Spinfunktion.

Der nächste Schritt besteht in der Berechnung der Matrixelemente von h in der durch (III.16) definierten Darstellung. Wir wollen hier im wesentlichen die Ergebnisse zitieren:

$$\langle N' l' m' m_s' | \mathring{H}_0 | N l m m_s\rangle = \hbar\omega_0 (N + \tfrac{3}{2})\, \delta_{NN'}\, \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}\, \delta_{m_s m_s'}, \qquad \text{(III.18)}$$

$$\langle N' l' m' m_s' | r^2 Y_2^0 | N l m m_s\rangle = \langle N' l' | r^2 | N l\rangle \langle l' m' | Y_2^0 | l m\rangle\, \delta_{m_s m_s'}. \qquad \text{(III.19)}$$

Mit

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\, Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)\, Y_{l_3}^{m_3 *}(\Omega)\, d\Omega = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}}\, c(l_1 l_2 l_3; m_1 m_2 m_3)\, c(l_1 l_2 l_3; 000) \qquad \text{(III.20)}$$

folgt:

$$\langle l' m' | Y_2^0 | l m\rangle = \sqrt{\frac{5}{4\pi} \frac{(2l+1)}{(2l'+1)}}\, c(l 2 l'; m 0 m')\, c(l 2 l'; 000). \qquad \text{(III.21)}$$

Für den ersten Faktor von (III.19) berechnet man mit Hilfe von Rekursionsformeln:

$$\begin{aligned} \langle N l | r^2 | N l\rangle &= N + \tfrac{3}{2}, \\ \langle N-2\, l | r^2 | N l\rangle &= \tfrac{1}{2} \sqrt{(N-l)(N+l+1)}, \\ \langle N\, l-2 | r^2 | N l\rangle &= \sqrt{(N-l+2)(N+l+1)}, \\ \langle N-2\, l-2 | r^2 | N l\rangle &= \tfrac{1}{2} \sqrt{(N+l+1)(N+l-1)}, \\ \langle N-2\, l+2 | r^2 | N l\rangle &= \tfrac{1}{2} \sqrt{(N-l)(N-l-2)}. \end{aligned} \qquad \text{(III.22)}$$

Für das Matrixelement (III.19) ergeben sich folgende Auswahlregeln (vgl. z.B. (III.21) und (III.22)):

$$N = \begin{cases} N' \\ N' \pm 2 \end{cases}; \quad l = \begin{cases} l' \\ l' \pm 2 \end{cases}; \quad m = m'; \quad m_s = m_s'. \qquad \text{(III.23)}$$

Für die weiteren Anteile von $\langle N' l' m' m_s' | h | N l m m_s \rangle$ läßt sich leicht nachprüfen:

$$\langle N' l' m' m_s' | \mathbf{l}^2 | N l m m_s \rangle = l(l+1)\,\delta_{NN'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,\delta_{m_s m_s'}, \qquad \text{(III.24)}$$

$$\langle N' l' m' m_s' | \mathbf{l}\cdot\mathbf{s} | N l m m_s \rangle = \{\tfrac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\delta_{m'm+1}\,\delta_{m_s'm_s-1} + \tfrac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{m'm-1}\,\delta_{m_s'm_s+1} + m\,m_s\,\delta_{m'm}\,\delta_{m_s'm_s}\}\,\delta_{N'N}\,\delta_{l'l}, \qquad \text{(III.25)}$$

wobei (III.25) wieder Auswahlregeln liefert:

$$N = N'; \quad l = l'; \quad m = \begin{cases} m' \\ m' \pm 1 \end{cases}; \quad m_s = \begin{cases} m_s' \\ m_s' \mp 1 \end{cases}. \qquad \text{(III.26a)}$$

Diagonalisation der Matrix. (III.23) und (III.26a) sind verträglich mit einer weiteren Auswahlregel, die sich aus $[h, j_z] = 0$ begründet

$$\Omega \equiv m + m_s = m' + m_s' \equiv \Omega', \qquad \text{(III.26b)}$$

d. h. die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses ist eine gute Quantenzahl.

Die Auswahlregel (III.23) enthält eine Kopplung zwischen den Hauptquantenzahlen N und $N \pm 2$. Man vernachlässigt diese Kopplung mit dem Argument, daß die Kopplungsmatrixelemente im allgemeinen klein sind gegen die Aufspaltung $2\hbar\omega_0$ vermöge $\mathring{H}_0$. Eine eingehendere Diskussion dieses Problems soll hier nicht gegeben werden. Der Leser sei hierzu auf die Arbeit von Nilsson [Ni 55] verwiesen. Mit dieser Näherung kann man jetzt die zu bestimmten Werten von N und Ω gehörenden Untermatrizen auf dem Computer diagonalisieren, was zu Einteilchenniveaus führt, die folgendermaßen bezeichnet werden:

$$\varepsilon_\alpha^{N\Omega}(\delta) = (N_\alpha + \tfrac{3}{2})\hbar\omega_0(\delta) + \kappa\hbar\mathring{\omega}_0 R_\alpha^{N\Omega}. \qquad \text{(III.27)}$$

Wahl der Parameter. Um die Schalenmodellniveaus bei verschwindender Deformation wiederzugeben, läßt man μ von Schale zu Schale variieren:

$N = 0, 1, 2$	$\mu = 0$	$\kappa = 0{,}05$
$N = 3$	$\mu = 0{,}35$	⋮
$N = 4, 5, 6$	$\mu = 0{,}45$	⋮
$N = 7$	$\mu = 0{,}4$	⋮

μ drückt die Niveaus mit höheren Bahndrehimpulsen herunter, κ bestimmt die Größe der Spin-Bahn-Aufspaltung.

Eine Abschätzung für die Oszillatorkonstante $\mathring{\omega}_0$ erhält man, wenn man für den mittleren quadratischen Kernradius setzt

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A} \langle r^2 \rangle_i \simeq \tfrac{3}{5}\,(1{,}2\,A^{1/3})^2\,\text{fm} \qquad \text{(III.28a)}$$

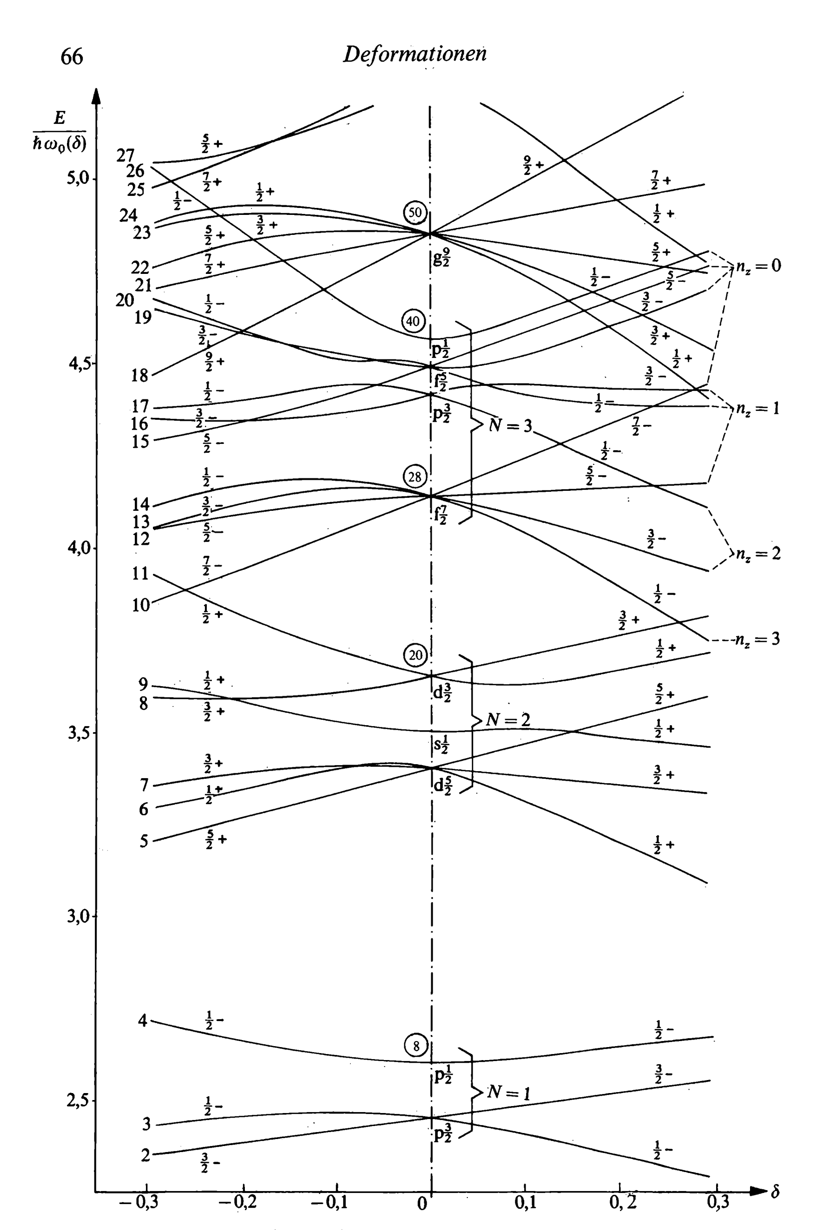


Fig. 20 Niveauschema im Nilsson-Modell.

und folgende Identität benutzt:

$$\frac{m}{2}\,\mathring{\omega}_0^2\langle r^2\rangle_i = \frac{\hbar\mathring{\omega}_0}{2}\,(N_i+\tfrac{3}{2}). \qquad \text{(III.28b)}$$

Zusammen mit (I.15) kann man aus (III.28b) $\langle R^2\rangle$ als Funktion von A näherungsweise berechnen ([Mo 57], S. 469). Für $\hbar\mathring{\omega}_0$ folgt damit:

$$\hbar\mathring{\omega}_0 \simeq 41\,A^{-1/3}\,\text{MeV}. \qquad \text{(III.28c)}$$

Trägt man mit diesen Parametern $\varepsilon_\alpha^{N\Omega}(\delta)$ in Einheiten von $\hbar\omega_0(\delta)$ als Funktion der Deformation auf, so erhält man Fig. 20.

Zuordnung von Quantenzahlen zu den Niveaus. Im Nilsson-Modell gibt es zwei exakte Quantenzahlen:

a) den Eigenwert Ω von j_z,

b) die Parität $\pi=(-1)^l$, die wegen $l=N-2n$ durch N festgelegt ist:

$$\begin{aligned}\pi &= +1, \quad \text{für } N \text{ gerade,}\\ \pi &= -1, \quad \text{für } N \text{ ungerade.}\end{aligned} \qquad \text{(III.29)}$$

Je nach Größe der Deformation δ fügt man zu Ω und π noch Quantenzahlen hinzu, die in den verschiedenen Deformationsbereichen näherungsweise Konstanten der Bewegung entsprechen.

Sehr kleine Deformationen. Die Niveaus kann man mit den Quantenzahlen l und j des isotropen Oszillators numerieren. Die Drehimpulsprojektionen Ω spalten etwa linear mit δ auf.

Sehr große Deformationen. Die deformationsunabhängigen Zusatzterme $\boldsymbol{l}^2$ und $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$ zum anisotropen Oszillator spielen nur noch die Rolle einer δ-unabhängigen Störung, vermöge derer die exakten Niveaus $\varepsilon(n_z,n_\rho,m)$ des anisotropen Oszillators aufspalten, die in Zylinderkoordinaten die Form haben:

$$\varepsilon(n_z n_\rho m)=\hbar\omega_z(n_z+\tfrac{1}{2})+\hbar\omega_x(2n_\rho+m+1). \qquad \text{(III.30)}$$

Mit (III.10) und (III.12) lautet ε bis auf Größen der Ordnung δ^2:

$$\varepsilon(n_z n_\rho m)\simeq\hbar\mathring{\omega}_0(n_z+2n_\rho+m+\tfrac{3}{2})+\tfrac{1}{3}\hbar\mathring{\omega}_0\,\delta(N-3n_z)+O(\delta^2). \qquad \text{(III.31)}$$

Für sehr große Deformationen ($\delta\simeq 0{,}3$) kann man also die Niveaus durch die zusätzlichen Quantenzahlen n_z,n_ρ,m charakterisieren.

Asymptotische Quantenzahlen. Unter Benutzung der Abkürzung

$$N=n_z+2n_\rho+m \qquad \text{(III.32)}$$

hat sich der Satz von Quantenzahlen $\Omega\pi[N\,n_z m]$ zur Charakterisierung der Nilsson-Niveaus bewährt. Er heißt deshalb asymptotisch, weil er

mit wachsender Deformation immer besser den wirklichen Konstanten der Bewegung entspricht. Anhand der Zustände mit $N=3$ wollen wir die Zuordnung der asymptotischen Quantenzahlen zu einzelnen Niveaus veranschaulichen.

Hierzu zeichnen wir zunächst (III.31) für $N=3$ auf:

$$\varepsilon(n_z n_\rho m) \simeq \tfrac{9}{2}\hbar\mathring{\omega}_0 + \hbar\mathring{\omega}_0\,\delta(1-n_z)\,.$$

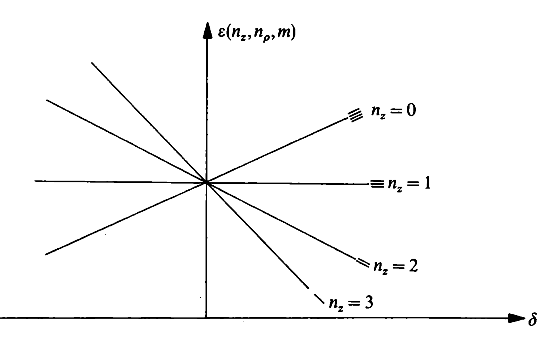


Fig. 21 Niveaus des anisotropen harmonischen Oszillators in Abhängigkeit von δ.

Mit

$$N - n_z = 2n_\rho + m\,,$$
$$\Omega = m \pm \tfrac{1}{2}$$

folgen für $N=3$ die in Tab. 2 angegebenen Werte.

Tab. 2 Zur Konstruktion der asymptotischen Quantenzahlen.

n_z	m	n_ρ	Ω		Entartungsgrad
0	1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	(4fach)
	3	0	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	
1	0	1	$\frac{1}{2}$		(3fach)
	2	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	
2	1	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	(2fach)
3	0	0	$\frac{1}{2}$		(1fach)

Die Niveaus in Fig. 21 sind also vermöge der Störung $-\kappa\hbar\mathring{\omega}_0(2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}+\mu\boldsymbol{l}^2)$ in $(4-n_z)$-Zustände aufgespalten. (Alle Niveaus sind noch zu $\pm\Omega$ entartet.) In Fig. 20 gehören zu $N=3$ die 10 Niveaus zwischen den magischen Abschlüssen 28 und 40. Das Niveau 14 z. B. hat $\Omega=\frac{1}{2}$, $\pi=-1$ und gehört zu der einfach entarteten Gruppe. Daher hat es die asymptotische Bezeichnung $\frac{1}{2}-[330]$. Das Niveau 16 ($\frac{3}{2}-$) stammt aus einer dreifach entarteten Gruppe und ist deshalb asymptotisch mit $\frac{3}{2}-[312]$ zu bezeichnen. Analog kann man für das ganze Nilsson-Schema vorgehen.

5. *Vergleich des Nilsson-Modells mit experimentellen Daten*

Berechnung der Gleichgewichtsdeformation δ_{eq} im Rahmen des Nilsson-Modells. Hierzu bestimmt man die Gesamtenergie des A-Nukleonensystems als Funktion der Deformation. Man kann dabei jedoch nicht einfach die Einteilchenenergien aufsummieren, da man sonst die Zweiteilchenwechselwirkung doppelt zählen würde (siehe auch Kapitel V, (V.34)). Faßt man das Einteilchenpotential V_i einfach als Summe aller auf das Teilchen wirkenden Zweiteilchenpotentiale auf (vgl. Kapitel V)

$$h_i = t_i + V_i = t_i + \sum_{j(\neq i)} v_{ij}, \tag{III.33}$$

so lautet der Hamiltonoperator:

$$H = \sum_{i=1}^{A} t_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i\neq j)}}^{A} v_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{A} h_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{A} t_i. \tag{III.34}$$

Hat V_i Oszillatorform, so gilt

$$\langle t_i \rangle = \langle V_i \rangle = \tfrac{1}{2} \langle h_i \rangle, \tag{III.35}$$

und aus (III.34) folgt für die Gesamtenergie:

$$E(\delta) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{A} \langle t_i \rangle = \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{A} \langle h_i \rangle = \frac{3}{4} \sum_{i=1}^{A} [\hbar\omega_0(\delta)(N_i + \tfrac{3}{2}) + r_i(\delta)]. \tag{III.36}$$

$$r_i(\delta) = \kappa\hbar\mathring{\omega}_0 R_{\alpha_i}^{N_i\Omega_i}$$

Hieraus berechnet sich die Deformation δ_{eq} im Gleichgewicht nach:

$$\left(\frac{\partial E(\delta)}{\partial \delta}\right)_{\delta_{eq}} = 0. \tag{III.37}$$

In diesem Verfahren ist natürlich die Restwechselwirkung in keiner Weise berücksichtigt. Dieses Problem wird uns im Kapitel VIII be-

schäftigen. Praktisch löst man (III.37), indem man $E(\delta)$ nach (III.36) für verschiedene Werte von δ berechnet. Der tiefste Wert von $E(\delta)$ ergibt sich für δ_{eq}.

In Fig. 22 werden diese Rechnungen mit Werten von δ verglichen, die sich aus gemessenen Quadrupolmomenten nach (III.5) ergeben. Die Übereinstimmung ist qualitativ befriedigend.

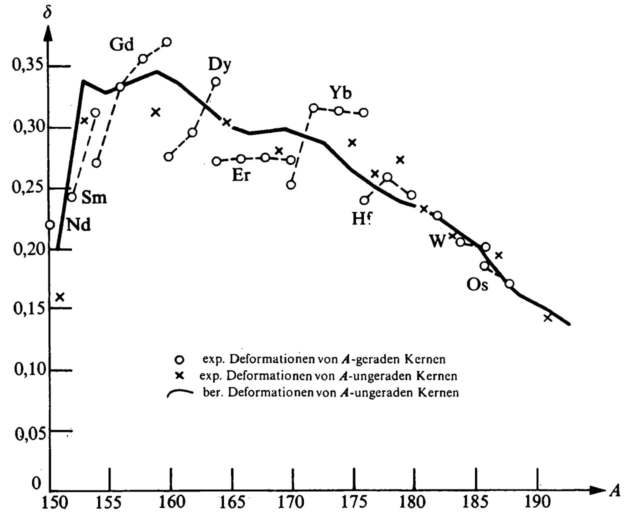


Fig. 22 Vergleich von berechneten und gemessenen Deformationsparametern [MN 59].

Gesamtdrehimpuls und Parität des Grundzustands. Das sphärische Schalenmodell versagt – wie bereits erwähnt – bei der Vorhersage der Grundzustandsdrehimpulse und Paritäten im Bereich der deformierten Kerne. Das Nilsson-Modell vermag diese Experimente in folgender Weise zu erklären.

Für einen bestimmten Kern ermittelt man aus dem gemessenen Quadrupolmoment Q_0 den Deformationsparameter δ und zählt im Nilsson-Niveauschema für dieses δ die zu besetzende Teilchenzahl von unten nach oben ab. Dann sollten nach der einfachsten Vorschrift für die Drehimpulskopplung (je zwei Teilchen sättigen sich zum Spin 0 ab) Drehimpuls und Parität des letzten Teilchens (für ungerade Kerne) den Grundzustand bestimmen. In Fig. 23 ist dies für ${}_{74}W^{183}_{109}$ als Beispiel durchgeführt. In Tab. 3 sind so bestimmte theoretische mit experimentellen Werten verglichen.

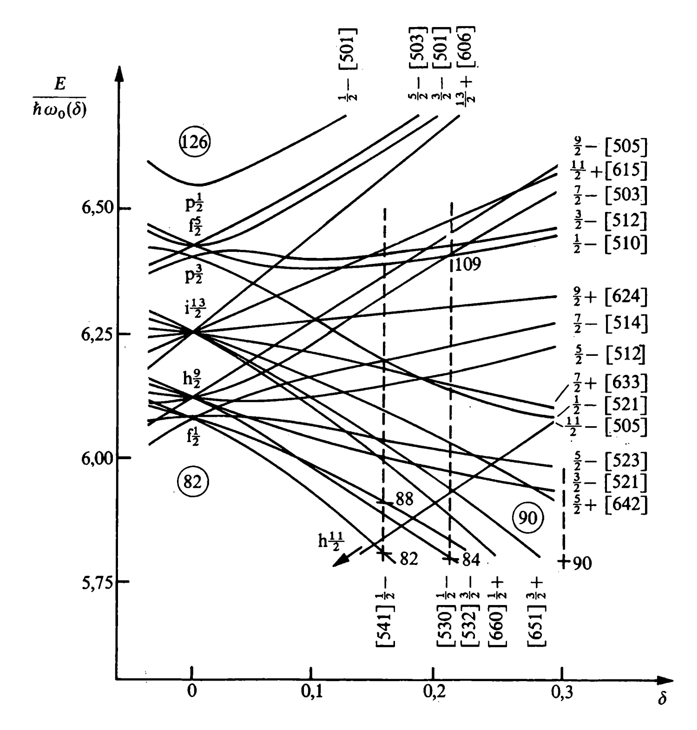


Fig. 23 Bestimmung von Grundzustandsdrehimpulsen nach dem Nilsson-Modell ([He 61], S. 647).

Tab. 3 Vergleich von berechneten und gemessenen Grundzustandsdrehimpulsen ([He 61], S. 648).

	δ	$I_{0\,\text{theo}}$	$I_{0\,\text{exp}}$		δ	$I_{0\,\text{theo}}$	$I_{0\,\text{exp}}$
$_{63}Eu^{151}$	0,16	$3/2^{\pm}, 5/2^{\pm}, 1/2^{-}$	5/2	Gd^{155}_{91}	0,31	$5/2^{+}, 3/2^{-}$	3/2
$_{63}Eu^{153}$	0,30	$5/2^{+}, 3/2^{+}$	5/2	Gd^{157}_{93}	0,31	$3/2^{-}, 5/2^{+}$	3/2
$_{65}Tb^{159}$	0,31	$3/2^{+}, 5/2^{+}$	3/2	Dy^{161}_{95}	0,31	$5/2^{-}$	
$_{67}Ho^{165}$	0,30	$7/2^{-}, 1/2^{+}$	7/2	Er^{167}_{99}	0,29	$1/2^{-}, 7/2^{+}, 11/2^{-}$	7/2
$_{69}Tm^{169}$	0,28	$1/2^{+}, 7/2^{-}$	1/2	Yb^{171}_{101}	0,29	$7/2^{+}, 1/2^{-}, 11/2^{-}$	1/2
$_{71}Lu^{175}$	0,28	$7/2^{+}, 5/2^{+}$	7/2	Yb^{173}_{103}	0,29	$5/2^{-}$	5/2
$_{73}Ta^{181}$	0,23	$5/2^{+}, 7/2^{+}$	7/2	Hf^{177}_{105}	0,26	$7/2^{-}$	7/2
$_{75}Re^{183}$	0,19	$9/2^{-}, (5/2^{+})$	5/2	Hf^{179}_{107}	0,27	$9/2^{+}$	9/2
$_{75}Re^{187}$	0,19	$9/2^{-}, (5/2^{+})$	5/2	W^{183}_{109}	0,21	$1/2^{-}, 7/2^{-}, 3/2^{-}$	1/2
$_{77}Ir^{191}$	0,14	$3/2^{+}, 1/2^{+}, 11/2^{-}$	3/2	Os^{187}_{111}	0,18	$1/2^{-}, 3/2^{-}, 9/2^{-}$	1/2
$_{77}Ir^{193}$	0,12	$3/2^{+}, 1/2^{+}, 11/2^{-}$	3/2	Os^{189}_{113}	0,15	$1/2^{-}, 3/2^{-}, 11/2^{+}, (9/2^{-})$	3/2

Die Ergebnisse sind befriedigend. Es ergeben sich meist zwei bis drei Möglichkeiten für I_0, unter denen sich stets der beobachtete Grundzustandsdrehimpuls befindet. Andere mögliche I-Werte sollten dann als niedrig liegende Einteilchenanregungen des Systems auftreten. Dies wurde inzwischen wie z.B. bei

$$\begin{aligned} Lu^{175}&: 342\,\text{keV},\ 5/2^+ \\ W^{183}&: 209\,\text{keV},\ 3/2^- \\ &\ 453\,\text{keV},\ 7/2^- \end{aligned}$$

experimentell ausnahmslos bestätigt (aus Mottelson, Nilsson [MN 55]).

Während der Gleichgewichtswert von δ (und damit auch das Quadrupolmoment) und Drehimpulse von deformierten Kernen nach dem Nilsson-Modell qualitativ recht gut verstanden werden können, versagt die Vorstellung von der unabhängigen Bewegung der Nukleonen in einem deformierten mittleren Potential bei Phänomenen wie den magnetischen Momenten, den niedrig liegenden Anregungsspektren (Rotationsbanden) und elektromagnetischen Übergangswahrscheinlichkeiten. Im *Rotationsmodell* der stark deformierten Kerne werden wir daher erstmals einen sog. *Kollektiveffekt* bei der Bewegung der Nukleonen zu untersuchen haben, d.h. wir werden annehmen, daß *alle* Nukleonen durch Rotation um eine gemeinsame Achse zu einem kollektiven Drehimpuls beitragen.

6. *Kollektive Rotationen*

Vorbemerkungen. Das Auftreten von *Rotationsbanden* in den Anregungsspektren einer Reihe von Kernen war einer der stärksten Gründe für die Annahme einer stabilen Deformation in diesen Massenbereichen. Noch vor der Formulierung des Nilsson-Modells haben Bohr und Mottelson [BM 53] vorgeschlagen, die kollektive Rotation eines deformierten Kerns zur Erklärung dieser Spektren zu benutzen. Sie konnten tatsächlich ein $I(I+1)$-Gesetz herleiten. Wir werden diesen Vorstellungen insoweit folgen, als wir ebenfalls überzählige Variable einführen, die die Lage des deformierten Potentials im Raum angeben (die Eulerschen Winkel α, β, γ). Hierzu werden wir den Kern als rotationssymmetrischen Kreisel auffassen, dessen Eigenfunktionen und Eigenwerte im folgenden zu bestimmen sind.

Modellhamiltonoperator und Zustandsfunktionen. Die Existenz von auf Einteilchenanregungen aufbauenden Rotationsbanden legt die Mög-

lichkeit der Aufspaltung des Hamiltonoperators in einen Anteil H_{in} der inneren Bewegung und einen der Rotationsenergie entsprechenden Anteil H_{rot} nahe:

$$H = H_{in} + H_{rot}. \tag{III.38}$$

Hierbei muß nachdrücklich betont werden, daß es bis heute nicht gelungen ist, (III.38) als Näherungsansatz für den exakten Hamiltonoperator mit Zweiteilchenwechselwirkung herzuleiten.

Bei der Konstruktion des Hamiltonoperators H_{rot} ist zu bedenken, daß ein System quantenmechanisch nicht um eine Symmetrieachse rotieren kann. Der Überlapp zweier Zustände $\Phi(\vartheta_1)$ und $\Phi(\vartheta_2)$, die sich nur im Drehwinkel um die Symmetrieachse unterscheiden, ist nämlich wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen gleich 1, d.h. die Zustände unterscheiden sich nur um einen Phasenfaktor. Rotiert das quantenmechanische System jedoch nicht um eine Symmetrieachse (z.B. senkrecht zur Symmetrieachse im Falle eines Rotationsellipsoids), so ist der Überlapp ungleich 1:

$$|\langle\Phi(\vartheta_1)|\Phi(\vartheta_2)\rangle|^2 \neq 1. \tag{III.39}$$

Unter der Annahme, daß der Kern in Form eines Rotationsellipsoids deformiert sei, dessen Symmetrieachse mit der 3-Achse des körperfesten Koordinatensystems zusammenfallen möge, folgt dann für H_{rot}:

$$H_{rot} = \sum_{i=1}^{2} \frac{\hbar^2}{2\Theta} R_i^2. \tag{III.40}$$

$\boldsymbol{R} = \{R_1, R_2, 0\}$ ist hierbei der Drehimpulsoperator der kollektiven Rotation, Θ das bereits in (III.1) erwähnte Trägheitsmoment.

Aus einer Reihe sog. Kopplungsschemata (vgl. z.B. [He61], S.599ff.) zwischen Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ des Systems, Drehimpuls $\boldsymbol{R}$ der kollektiven Rotation und Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{j}$ der inneren Bewegung greifen wir als Beispiel eines heraus (Fig. 24), das z.B. für den Fall eines Rotationsellipsoids realisiert ist.

In diesem Fall steht $\boldsymbol{R}$ senkrecht auf der körperfesten 3-Achse. Der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{j}$ der inneren Bewegung ist im Nilsson-Modell keine gute Quantenzahl, da wegen der Annahme einer festen Deformation die Drehinvarianz verletzt wird (analog zur Verletzung der Translationsinvarianz im Schalenmodell). In einem klassischen Bild bedeutet dies, daß $\boldsymbol{j}$ um die 3-Achse präzediert. Das entspricht quantenmechanisch der Unschärfe der 1- und 2-Komponenten von $\boldsymbol{j}$, was man auch als ständigen Drehimpulsaustausch zwischen kollektiver und innerer Drehbewegung

und damit als Kopplung zwischen $\boldsymbol{R}$ und $\boldsymbol{j}$ interpretieren kann. Mit dem Kopplungsschema von Fig. 24 kann man den Hamiltonoperator (III.38) in eine andere Form umschreiben:

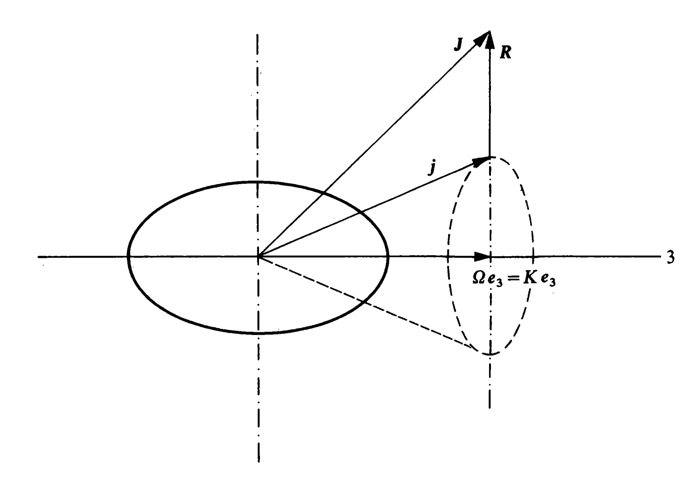


Fig. 24 Kopplungsschema eines kollektiven Rotationsmodells (für rotationselliptische Deformation).

$$H = H'_{\text{in}} + H^0_{\text{rot}} + H_{\text{Kopp}}; \tag{III.41a}$$

mit

$$H'_{\text{in}} = H_{\text{in}} + \frac{\hbar^2}{2\Theta}(j^2 - j_3^2), \tag{III.41b}$$

$$H^0_{\text{rot.}} = \frac{\hbar^2}{2\Theta}(J^2 - J_3^2), \tag{III.41c}$$

$$H_{\text{Kopp}} = -\frac{\hbar^2}{2\Theta}(J_1 j_1 + J_2 j_2) = -\frac{\hbar^2}{2\Theta}(J_+ j_- + J_- j_+). \tag{III.41d}$$

H_{Kopp} beschreibt die Kopplung zwischen der inneren Bewegung und der äußeren Rotation und wird im allgemeinen klein gegen H^0_{rot} sein (nähere Diskussion s.u.).

Die Vernachlässigung von H_{Kopp} kann man auch als Weglassen der Komponenten j_1 und j_2 von $\boldsymbol{j}$ auffassen, wodurch sich das Kopplungsschema von Fig. 24 zu dem von Fig. 25 vereinfacht.

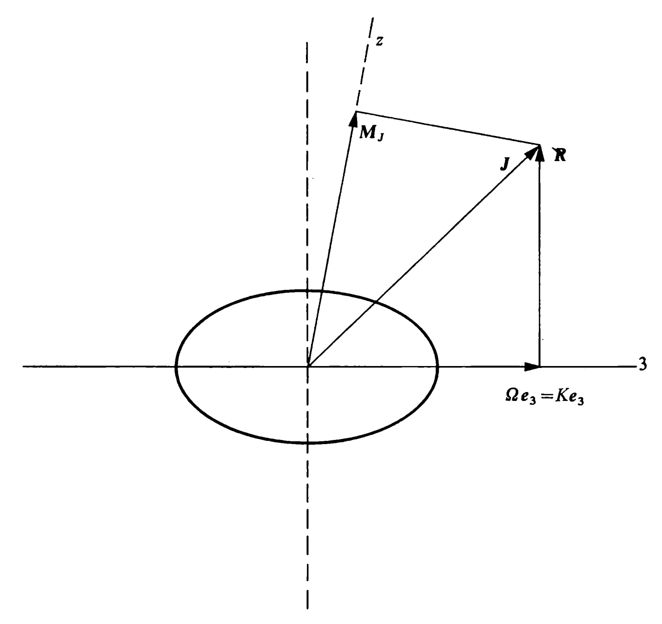


Fig. 25 Kopplungsschema bei Vernachlässigung von H_{Kopp}.

Da H^0_{rot} genau die Form eines axialsymmetrischen Kreisels hat, ist eine Eigenfunktion von $H'_{\text{in}} + H^0_{\text{rot}}$ (abgesehen von der Nichtdiagonalität von $j_1^2 + j_2^2$, die von derselben Ordnung wie H_{Kopp} klein ist) gegeben durch:

$$\Psi^I_{MK} = \sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}}\; \chi^\tau_K(\boldsymbol{q})\, D^I_{MK}(\vartheta_i). \qquad \text{(III.42)}$$

Hierbei bedeutet $\chi^\tau_K(\boldsymbol{q})$ die innere Wellenfunktion des deformierten Kerns, τ ist, mit Ausnahme der 3-Komponente K des inneren Gesamtdrehimpulses, die Gesamtheit aller Quantenzahlen, die den inneren Zustand kennzeichnen. $\boldsymbol{q}$ sind alle Koordinaten, die den inneren Zustand im körperfesten (1, 2, 3)-System beschreiben. Im einfachsten Fall, bei dem der innere Zustand durch das äußerste Nukleon beschrieben wird, das sich

im deformierten Potential aller übrigen bewegt, ist $\chi_K^\tau(\boldsymbol{q})$ nichts anderes als eine Eigenfunktion des Nilsson-Hamiltonoperators h (III.14a). Die Funktionen $D_{MK}^I(\vartheta_i)$ sind die Eigenfunktionen des symmetrischen Kreisels (s. z.B. Edmonds [Ed 64], Kapitel IV) mit folgenden Eigenschaften:

$$J^2 D_{MK}^I = I(I+1) D_{MK}^I, \qquad \text{(III.43a)}$$

$$J_z D_{MK}^I = M D_{MK}^I, \qquad \text{(III.43b)}$$

$$J_3 D_{MK}^I = K\, D_{MK}^I. \qquad \text{(III.43c)}$$

J_z ist die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses im raumfesten Koordinatensystem, J_3 die Komponente im körperfesten System. Die ϑ_i sind die drei Eulerschen Winkel.

Ist der Kern in Form eines Rotationsellipsoids deformiert (z. B. gg-Kerne im Grundzustand), so herrscht neben der Rotationssymmetrie um die 3-Achse auch noch Spiegelungssymmetrie bezüglich einer Ebene, die senkrecht zur 3-Achse durch das Zentrum geht. Diese Symmetrie kann durch eine explizite Symmetrisierung von (III.42) berücksichtigt werden, indem man den Zustand mit seinem gespiegelten linearkombiniert und normiert (vgl. [NN 65], S. 645):

$$\Psi_{MK}^I = \sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}}\, \frac{1}{\sqrt{2}}\, [\chi_K^\tau(\boldsymbol{q}) D_{MK}^I(\vartheta_i) + R_i R_e^{-1} \chi_K^\tau(\boldsymbol{q}) D_{MK}^I(\vartheta_i)]. \qquad \text{(III.44)}$$

R_i, R_e sind die Drehoperatoren, die die Spiegelung bewerkstelligen. Denkt man sich χ_K^τ nach Eigenfunktionen zu $\boldsymbol{j}^2$ entwickelt

$$\chi_K^\tau(\boldsymbol{q}) = \sum_j c_j \chi_{K,j}^\tau(\boldsymbol{q}), \qquad \text{(III.45a)}$$

so folgt aus (III.44)

$$\Psi_{MK}^I = \frac{1}{4\pi} \sqrt{2I+1} [\chi_K^\tau(\boldsymbol{q}) D_{MK}^I(\vartheta_i) + (-1)^{I-j} \chi_{-K}^\tau(\boldsymbol{q}) D_{M-K}^I(\vartheta_i)], \qquad \text{(III.45b)}$$

wobei $(-1)^j$ einzeln auf jede Komponente der Entwicklung (III.45a) wirkt (vgl. auch [Mo 57], S. 483).

Energiespektrum. Die Eigenwerte von $H_{\text{in}}' + H_{\text{rot}}^0$ kann man aus (III.43a, c) und (III.45b) ablesen:

$$E_K(I) = E_K^0 + \frac{\hbar^2}{2\Theta} I(I+1) \equiv E_K^0 + E_I. \qquad \text{(III.46)}$$

Dies ist also genau das Spektrum einer Rotationsbande, deren Zustände sich bei gleicher innerer Wellenfunktion nur durch verschiedene Werte

des Gesamtdrehimpulses unterscheiden. Nach dem Kopplungsschema von Fig. 25 ist der Gesamtdrehimpuls I_0 des Zustands, auf dem die Bande aufbaut, gegeben durch K. Damit folgt für das Bandenspektrum, gemessen relativ zum Grundzustand der Bande:

$$E(I) \equiv E_{I_0}(I) - E_{I_0}(I_0) = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left[I(I+1) - I_0(I_0+1)\right]. \qquad \text{(III.47)}$$

Bisher haben wir den Term H_{Kopp} außer acht gelassen. In niedrigster Ordnung mischen bei seiner Diagonalisation im Raum der Ψ^I_{MK} nur Rotationsniveaus aus Banden mit $\Delta K = 1$. Für Werte von K ungleich $\frac{1}{2}$ führt dies zu einer schwachen Bandenmischung, auf die wir hier nicht eingehen wollen. Für $K = \frac{1}{2}$ treten auch Diagonalelemente auf, die so groß sind, daß sie den $I(I+1)$-Charakter der Bande zerstören (vgl. z.B. [NN65], S. 647ff.):

$$E_{K=\frac{1}{2}}(I) = E^0_{K=\frac{1}{2}} + \frac{\hbar^2}{2\Theta}\left[I(I+1) + a(-1)^{I+\frac{1}{2}}(I+\tfrac{1}{2})\right]. \qquad \text{(III.48a)}$$

Der *Entkopplungsfaktor* a ist gegeben durch

$$a = -\langle \Psi^I_{M\frac{1}{2}} | j_+ | \Psi^I_{M-\frac{1}{2}} \rangle. \qquad \text{(III.48b)}$$

Im Falle $a = 1$ hat das Spektrum (III.48a) für die Drehimpulse $I = 2\nu + \frac{1}{2}$ dieselbe Form wie (III.46) für $I = 2\nu$, d.h. die innere und die kollektive Bewegung sind hierbei entkoppelt.

Zwischen den Spektren von Kernen mit gerader bzw. ungerader Massenzahl besteht ein Unterschied, der von der Symmetrie des Systems herrührt. So haben gg-*Kerne* im Grundzustand $I_0 = K = 0$. Damit folgt aus (III.45b), daß I nur geradzahlige Werte annehmen kann (unter der Voraussetzung, daß die innere Wellenfunktion χ^τ_K nur gerade Werte von j enthält, was jedoch für die tiefliegenden Zustände von gg-Kernen erfüllt ist). Die Grundzustandsbande von gg-Kernen besitzt demnach die Termfolge:

$$I = 0, 2, 4, \ldots \qquad \text{(III.49a)}$$

Bei *ungeraden Kernen* ist nach der einfachsten Kopplungsvorschrift I_0 gleich dem Drehimpuls des ungepaarten Nukleons (die Nilsson-Niveaus sind zu $\pm\Omega$ entartet und werden paarweise besetzt). Im allgemeinen sind die Kerne dann auch nicht mehr spiegelungssymmetrisch, und die Termfolge hat die Form:

$$I = I_0,\ I_0+1,\ I_0+2, \ldots \qquad \text{(III.49b)}$$

7. *Vergleich des Rotationsmodells mit dem Experiment*

Rotationsbanden. Die Konstruktion des Modells war von Anfang an eng verknüpft mit dem Phänomen der tiefliegenden *Banden* in den Anregungsspektren der deformierten Kerne. In Fig. 26 und Fig. 27 wird gezeigt, mit welcher Exaktheit die Experimente dem $I(I+1)$-Gesetz folgen und wie genau sich die $(K=\frac{1}{2})$-Bande aus Formel (III.48a) ergibt.

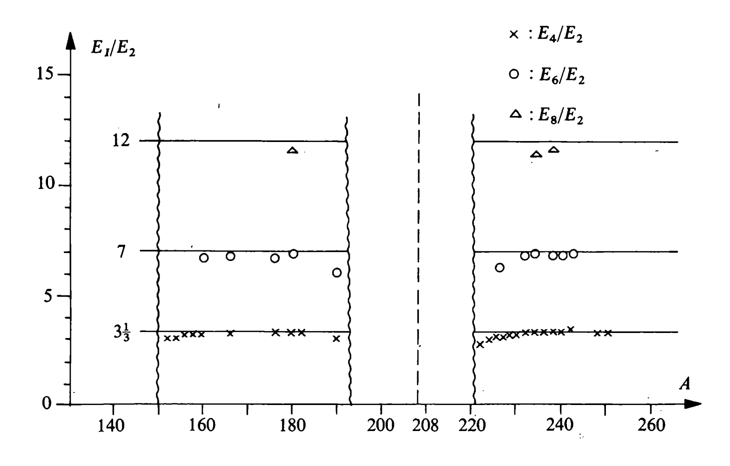


Fig. 26 Empirische E_I/E_2-Verhältnisse (Nach Alder et al. [Al 56]).

Magnetische Momente. Das magnetische Moment μ ist nach (II.21) definiert als Erwartungswert der z-Komponente der Magnetisierung $\mu=\mu^{(B)}+\mu^{(S)}$:

$$\mu=\langle \Psi^I_{IK}|\mu_z|\Psi^I_{IK}\rangle. \qquad \text{(III.50a)}$$

Die $|\Psi^I_{IK}\rangle$ sind im Rotationsmodell gegeben durch (III.45b). Durch einfache Umschreibung folgt (vgl. [EL 57], S. 253) aus (III.50a):

$$\mu=\frac{1}{I+1}\langle \Psi^I_{IK}|\boldsymbol{\mu}\cdot \boldsymbol{J}|\Psi^I_{IK}\rangle. \qquad \text{(III.50b)}$$

Für das Kopplungsschema der Fig. 25 gilt:

$$\boldsymbol{J}=K\boldsymbol{e}_3+\boldsymbol{R}. \qquad \text{(III.51)}$$

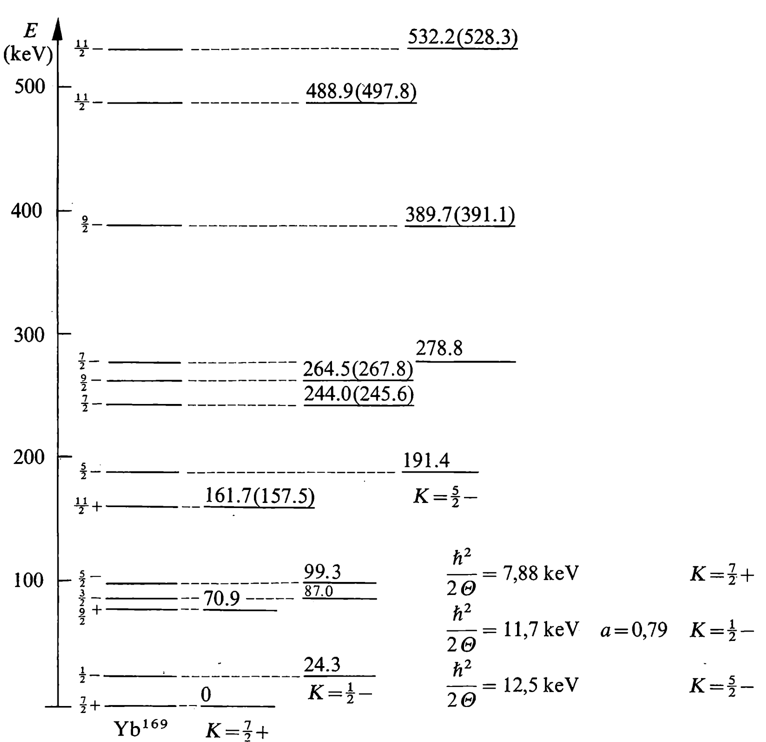


Fig. 27 Das Spektrum von Yb^{169} bis etwa 0,5 MeV Anregungsenergie und seine Erklärung durch die Rotationsbanden $K={}^7/_2+$, ${}^1/_2-$, ${}^5/_2-$ nach (III.46) und (III.48a). Das Trägheitsmoment wird an das erste Rotationsniveau angepaßt.
(Aus Nathan, Nilsson [NN 65], S. 648.)

Durch Einführung gyromagnetischer Verhältnisse g_K und g_R für die innere bzw. kollektive Rotation läßt sich $\boldsymbol{\mu}$ durch $K\boldsymbol{e}_3$ und $\boldsymbol{R}$ ausdrücken:

$$\boldsymbol{\mu}=g_K K\boldsymbol{e}_3+g_R\boldsymbol{R}. \tag{III.52}$$

Damit folgt:

$$\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{J}=g_K K(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{e}_3)+g_R\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}-K\boldsymbol{e}_3). \tag{III.53}$$

Aus (III.50b) ergibt sich hiermit für μ:

$$\mu=\frac{1}{I+1}\left[(g_K-g_R)K^2+g_R I(I+1)\right]. \tag{III.54}$$

Unter gewissen Annahmen für die gyromagnetischen Verhältnisse g_K und g_R (vgl. [Da 63], S. 90f. und [NN 65], S. 653f., 684ff.) liefert (III.54) im Gegensatz zu der einfachen Abschätzung von μ nach dem sphärischen Schalenmodell sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment (Tab. 4). Man vergleiche auch Rechnungen von Mottelson und Nilsson [MN 59].

Tab. 4 Die magnetischen Momente von Kernen mit Spin $\frac{5}{2}$ (Nach [Da 63], S. 90).

Kerne mit ungerader Protonenzahl			Kerne mit ungerader Neutronenzahl		
	Experiment	Theorie		Experiment	Theorie
Al^{27}	3,64	3,77	Mg^{25}	−0,86	−0,67
Sb^{121}	3,36	3,73	Mo^{95}	−0,91	−0,81
Cs^{131}	3,48	3,73	Pd^{105}	−0,60	−0,81
Pr^{151}	3,90	3,73	Cd^{111}	−0,70	−0,81
Re^{187}	3,20	3,71			

Elektromagnetische Übergänge. Bei gg-Kernen sind die Übergänge zwischen benachbarten Rotationsniveaus derselben Bande stets E2-Übergänge, wie dies zwischen Zuständen gleicher Parität mit einer Drehimpulsdifferenz $\Delta I = 2$ nach den allgemeinen Auswahlregeln sein muß (II.62). Für ungerade Kerne tritt auch M1-Strahlung auf. Aus den gemessenen Übergangswahrscheinlichkeiten kann, wie bereits erwähnt, der Deformationsparameter δ bestimmt werden, oder man kann z.B. nach (III.7) oder [Da 63], S. 380, die Übergangswahrscheinlichkeiten bei vorgegebenem Quadrupolmoment Q_0 berechnen. Da – wie wir gesehen haben (vgl. Fig. 22) – die theoretischen und experimentellen Werte für δ und damit für Q_0 gut übereinstimmen, vermag also das Deformationsmodell in gewissen Spektralbereichen (Rotationsbanden), im Gegensatz zu den falschen Vorhersagen des Einteilchenmodells, Übergänge mit kollektiven Stärken befriedigend zu erklären.

Die Aussagen, die man bei Multipolstrahlung zwischen Zuständen verschiedener Banden erhält, stimmen ebenfalls zwischen Theorie und Experiment gut überein ([Mo 57], S. 489ff.). Übergänge zwischen inneren Anregungen dagegen werden vom Einteilchen-Nilsson-Modell (Nilsson-Abschätzung) meist ungenügend erklärt. Die Diskussion möglicher Verfeinerungen überschreitet den Rahmen dieses Buches. Wir verweisen hierfür auf die Arbeit von Löbner und Malmskog [LM 66], in

der neben einer Übersicht über das experimentelle Material auch eine Reihe von Möglichkeiten zur Verbesserung der einfachen Nilsson-Abschätzung diskutiert wird.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die Vorstellung von sich näherungsweise unabhängig in einem mittleren Potential bewegenden Nukleonen auch auf die Massenzahlbereiche ausgedehnt werden kann, in denen das einfache Schalenmodell versagt.

IV. KERNKRÄFTE

1. Einleitung

In den bisherigen Kapiteln wurden die zwischen den Nukleonen herrschenden Kräfte nur insofern berücksichtigt, als wir annahmen, daß sie Anlaß zu einem mittleren Potential geben. Die Resultate, die wir mit solchen Schalenmodellen gewannen, waren mehr oder weniger qualitativer Natur; sie erlaubten es uns aber dennoch, sehr viele kernphysikalische Daten unter einem gemeinsamen Gesichtspunkt systematisch einzuordnen. Dieser Erfolg des Modells der unabhängigen Bewegung der Nukleonen berechtigt uns, es zum Ausgangspunkt einer verfeinerten Betrachtung des Kerns zu wählen.

Hierzu werden wir von der in (I.33) angegebenen Restwechselwirkung ausgehen müssen, d.h. wir haben uns zunächst etwas eingehender mit der Natur der Kernkräfte zu befassen. Da bis heute keine befriedigende Theorie der Kernkräfte bekannt ist, wollen wir uns damit begnügen, aus allgemein gültigen Erfahrungssätzen Aussagen über ihre Natur zu gewinnen. Wiederholen wir zunächst die zwei Grundannahmen über die Art der Wechselwirkung in einem Atomkern:

a) Die Wechselwirkung ist durch ein Potential darstellbar (in Analogie zu den elektromagnetischen und den Gravitationskräften);

b) nur Zweikörperkräfte sind wichtig.

Wir können so die Abhängigkeit der Wechselwirkung von den Orts-, Impuls-, Spin- und Isospinvariablen durch Invarianzprinzipien bzw. Symmetrien einschränken, die sich aus den Erfahrungssätzen herleiten. Das auf diese Weise gewonnene Zweiteilchenpotential enthält aber noch eine Reihe von Koeffizienten bzw. Funktionen, die zunächst willkürlich wählbar sind. Man wird jedoch versuchen, sie an experimentelle Daten anzupassen, wie etwa an Nukleon-Nukleon-Streudaten oder an Eigenschaften einfach zu überblickender Nukleonensysteme (z.B. Quadrupolmoment und Bindungsenergie des Deuterons).

Wir werden in Abschnitt 2 die Invarianzprinzipien formulieren und sie in Abschnitt 3 auf lokale Zweiteilchenpotentiale anwenden. Im letzten Abschnitt werden wir dann die Betrachtungen auf nichtlokale Kräfte erweitern.

2. *Symmetrien und Invarianzen*

Das zu bestimmende Zweiteilchenpotential $v(\boldsymbol{r}_1 \boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{\sigma}_1 t_1, \boldsymbol{r}_2 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{\sigma}_2 t_2) \equiv$ $\equiv v(1,2)$ muß nach der allgemeinen Erfahrung folgende Eigenschaften erfüllen:

a) Hermitezität,
b) Vertauschungsinvarianz bezüglich der Koordinaten *1* und *2*,
c) Translationsinvarianz,
d) Galileiinvarianz,
e) Invarianz gegen Drehung im Raum,
f) Invarianz gegen Drehung im Isospinraum,
g) Raumspiegelungsinvarianz,
h) Zeitspiegelungsinvarianz.

Symmetrien der Zweiteilchenwellenfunktion. Um zu einer Charakterisierung der Zweiteilchenwechselwirkung zu gelangen, müssen wir die Symmetrieeigenschaften eines Zweiteilchenzustandes $|12\rangle$ untersuchen. Da wir es mit Fermiteilchen zu tun haben, muß $|12\rangle$ total antisymmetrisch sein. Betrachtet man einen Produktzustand aus Orts-, Spin- und Isospinanteilen

$$\langle \boldsymbol{r}, s, t | 12 \rangle = \varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \chi(s_1, s_2) \zeta(t_1, t_2), \qquad \text{(IV.1)}$$

so sind mit dem Pauliprinzip folgende Symmetrien von φ, χ, ζ verträglich:

$\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$	$\chi(s_1, s_2)$	$\zeta(t_1, t_2)$
symmetrisch	symmetrisch	antisymmetrisch
	antisymmetrisch	symmetrisch
antisymmetrisch	symmetrisch	symmetrisch
	antisymmetrisch	antisymmetrisch

(IV.2)

Für einen solchen Zweiteilchenzustand genügt es also, die Symmetrie von nur zwei Anteilen anzugeben, da die Symmetrie des dritten durch das Pauliprinzip festgelegt ist. Im allgemeinen werden Orts- und Spin-Anteil angegeben. Unter Berücksichtigung der Translationsinvarianz

(s. u.) sieht man, daß ein Zustand, der bei Vertauschung der Ortskoordinaten $\boldsymbol{r}_1$ und $\boldsymbol{r}_2$ symmetrisch bzw. antisymmetrisch ist, gleichzeitig auch eine gerade (even) bzw. ungerade (odd) Funktion in $\boldsymbol{r}_{12}$ darstellt. Wir können die Symmetrie eines Zweiteilchenzustandes also in folgender Weise kennzeichnen (Tab. 5; es ist üblich, die englische Notation zu verwenden).

Tab. 5 Charakterisierung der Symmetrien eines Zweiteilchenzustandes.

φ	χ	
even	singulett	es
even	triplett	et
odd	singulett	os
odd	triplett	ot

Vertauschungsinvarianz. Da $v(1,2)$ zwischen identischen Teilchen wirkt, muß

$$v(1,2) = v(2,1) \qquad \text{(IV.3)}$$

gelten.

Translationsinvarianz. Das Potential darf sich nicht ändern, wenn das Koordinatensystem um einen konstanten Vektor $\boldsymbol{a}$ verschoben wird, d. h.:

$$v(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = v(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{a}, \boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{a}). \qquad \text{(IV.4)}$$

Transformiert man auf Relativ- und Schwerpunkts-Koordinaten

$$\boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{R}_{12} = \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2), \qquad \text{(IV.5)}$$

so liest sich (IV.4):

$$v(\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{R}_{12}) = v(\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{R}_{12} + \boldsymbol{a}). \qquad \text{(IV.6)}$$

Das heißt, $v(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ kann nur von der Relativkoordinate abhängen:

$$v(1,2) = v(\boldsymbol{r}_{12}, \sigma_1, \tau_1, \sigma_2, \tau_2). \qquad \text{(IV.7)}$$

Galileiinvarianz. Diese Invarianz besagt, daß zwei Koordinatensysteme, die sich relativ zueinander mit gleichförmiger Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ bewegen, gleichwertig sind.

Bei der Transformation

$$\boldsymbol{p}_i' = \boldsymbol{p}_i + m\boldsymbol{v} \qquad \text{(IV.8)}$$

darf sich demnach das Potential nicht ändern, wodurch die Abhängigkeit auf den Relativimpuls eingeschränkt wird:

$$v(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = v(\boldsymbol{p}_{12}) = v\left(\frac{\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2}{2}\right). \tag{IV.9}$$

Drehinvarianz. Zunächst nutzen wir einige Eigenschaften der Paulimatrizen aus, die eine Beschränkung auf lineare Terme in $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ (und auch $\boldsymbol{\tau}^{(1)}, \boldsymbol{\tau}^{(2)}$) erlauben, da sich höhere Potenzen immer auf die erste Potenz zurückführen lassen.

Mit $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$ und $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0$, für $i \neq j$, beweist man z.B. leicht folgende Beziehungen:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}, \tag{IV.10a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^2 = 3, \tag{IV.10b}$$

$$(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \boldsymbol{a}^2, \tag{IV.10c}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2 = 3 - 2(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}). \tag{IV.10d}$$

Allgemein können wir deshalb für jede Funktion f, die eine Taylorreihe besitzt, schreiben:

$$f(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}) = a + b\,\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}. \tag{IV.11a}$$

Aus der Anwendung dieser Operatorenbeziehung auf einen Gesamtspin-Triplett- bzw. -Singulettzustand ($S=1$ bzw. $S=0$) folgen zwei Bestimmungsgleichungen für a und b:

$$\begin{aligned} f(-3) &= a - 3b, \\ f(1) &= a + b. \end{aligned} \tag{IV.11b}$$

Wegen (IV.10) und (IV.11) können wir uns auf folgende Kombinationen von $\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ beschränken, die gegenüber Drehungen des Koordinatensystems invariant sind:

$$r_{12}, \quad \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}, \quad \boldsymbol{r}_{12} \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \times \boldsymbol{\sigma}^{(2)}), \quad \boldsymbol{r}_{12} \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} - \boldsymbol{\sigma}^{(2)}), \quad (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}_{12}). \tag{IV.12}$$

Drehinvarianz im Isospinraum. Im Isospinformalismus werden Proton und Neutron formal als die zwei Zustände eines (Isospin $= \frac{1}{2}$)-Dubletts beschrieben, wobei die zweidimensionale Darstellung der Drehgruppe alle Transformationseigenschaften des Systems wiedergibt (s. Kap. I). Wie beim Spin werden die Transformationsmatrizen (Paulimatrizen) zu einem Vektor $\boldsymbol{t}$ zusammengefaßt:

$$\boldsymbol{t}^{(i)} = (t_1^{(i)}, t_2^{(i)}, t_3^{(i)}). \tag{IV.13}$$

In diesem Formalismus stellt sich die Ladungsunabhängigkeit der Kernkräfte, die z. B. in der Nukleon-Nukleon-Streuung (p−p; p−n; n−n) und durch die symmetrischen Eigenschaften der Spiegelkerne (z. B. He^3 und H^3) experimentell gut bestätigt ist, als Invarianz des Hamiltonoperators gegen Drehungen im Isospinraum dar. Man kann nämlich den vierdimensionalen Produktraum

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{t}^{(1)} + \boldsymbol{t}^{(2)} \tag{IV.14}$$

in zwei orthogonale Unterräume ausreduzieren, wobei der eine aus den Basisvektoren $|1\,1\rangle$, $|1\,0\rangle$ $|1-1\rangle$ des Isospintripletts, der andere aus $|0\,0\rangle$, dem Isospinsingulett besteht (für die Nukleon-Nukleon-Streuung entsprechen diese Vektoren der p−p-, p−n-, n−n-Streuung und der p−n-Streuung; p−n kann also sowohl im Triplett- als auch im Singulett-Zustand auftreten).

Berücksichtigt man noch, daß lediglich die Kräfte zwischen zwei Nukleonen im Triplett- bzw. im Singulett-Zustand gleich sind, da diese Zustände verschiedene Symmetrie besitzen und somit über das Pauliprinzip eine Abhängigkeit vom Gesamtisospin auftritt, dann heißt Ladungsunabhängigkeit Invarianz gegen unitäre Transformationen in den Unterräumen. Zusammen mit den Eigenschaften der Paulimatrizen gibt es aber nur zwei Kombinationen aus $\boldsymbol{t}^{(1)}$ und $\boldsymbol{t}^{(2)}$, die diese Invarianz erfüllen:

$$(\boldsymbol{t}^{(1)} \cdot \boldsymbol{t}^{(2)})^0 = 1, \quad \boldsymbol{t}^{(1)} \cdot \boldsymbol{t}^{(2)} \equiv \tfrac{1}{4} \boldsymbol{\tau}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(2)}. \tag{IV.15}$$

Raumspiegelungsinvarianz. Diese Invarianz, die – im Gegensatz zur schwachen Wechselwirkung – bei der starken Wechselwirkung nicht in Frage gestellt ist, verlangt

$$v(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = v(-\boldsymbol{r}, -\boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}), \tag{IV.16}$$

d. h. der Hamiltonoperator vertauscht mit dem Paritätsoperator. Damit werden die möglichen Kombinationen der einzelnen Operatoren folgendermaßen eingeschränkt:

$$f(r_{12}),\ \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)},\ (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}_{12}),\ \boldsymbol{\tau}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(2)}. \tag{IV.17}$$

Zeitspiegelungsinvarianz. Hierdurch wird die Unabhängigkeit der Bewegungsgleichungen von der Richtung ausgedrückt, in der die Zeitachse durchlaufen wird. Es muß also gelten:

$$v(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = v(\boldsymbol{r}, -\boldsymbol{p}, -\boldsymbol{\sigma}). \tag{IV.18}$$

Dies ist bei den in (IV.17) verbliebenen Ausdrücken erfüllt. Wir erhalten schließlich folgende allgemeinste Form eines von den Koordinaten *1* und *2* abhängigen Zweinukleonenpotentials:

$$v(1,2)=V_{00}(r_{12})+V_{0\sigma}(r_{12})\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}+V_{0\tau}(r_{12})\boldsymbol{\tau}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(2)}$$
$$+V_{0\sigma\tau}(r_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)})(\boldsymbol{\tau}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(2)}) \qquad \text{(IV.19)}$$
$$+\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2}-\frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\right]\left[V_{10}(r_{12})+V_{1\tau}(r_{12})\boldsymbol{\tau}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(2)}\right].$$

Die Hermitezität dieses Ausdrucks ist gewährleistet, wenn man alle Koeffizienten V reell wählt.

3. *Diskussion des Potentials v(1,2)*

Zentralkräfte. Die ersten vier Terme in (IV.19) hängen nur vom Betrag des Abstands der beiden Teilchen ab und werden daher als Zentralkraft bezeichnet. Es ist üblich, sie entweder durch Austausch- oder durch Projektionsoperatoren auszudrücken.

a) *Austauschoperatoren.* Die Operatoren

$$P_{12}^{\sigma}=\tfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}), \qquad \text{(IV.20a)}$$
$$P_{12}^{\tau}=\tfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\tau}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(2)}) \qquad \text{(IV.20b)}$$

tauschen, wie man bei Anwendung auf einen Triplett- bzw. Singulettzustand leicht sieht, die Spin- bzw. Isospin-Koordinaten in $|12\rangle$ aus:

	$\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$	P_{12}^{σ}
$\|12\rangle_{\text{trip}}$	1	1
$\|12\rangle_{\text{sing}}$	-3	-1

(IV.21)

(entsprechend für den Isospin).

Definiert man einen Operator P_{12}^{r}, der die Ortskoordinaten austauscht, so schreibt sich das Pauliprinzip in der Form:

$$P_{12}^{r}P_{12}^{\sigma}P_{12}^{\tau}=-1. \qquad \text{(IV.22)}$$

Damit lassen sich die Spin- und Isospinanteile der Zentralkraft durch die Austauschoperatoren ausdrücken, wobei folgende Wahl üblich ist:

$$v(1,2)=V_{\mathrm{W}}(r_{12})+V_{\mathrm{M}}(r_{12})P_{12}^{r}+V_{\mathrm{B}}(r_{12})P_{12}^{\sigma}+V_{\mathrm{H}}(r_{12})P_{12}^{r}P_{12}^{\sigma}. \qquad \text{(IV.23)}$$

Eine Beziehung zwischen den alten und neuen Koeffizienten erhält man, indem man die Operatoridentitäten (IV.19) (nur Zentralkraftanteil)

und (IV.23) auf die vier Zustände $|es\rangle$, $|et\rangle$, $|os\rangle$ und $|ot\rangle$ anwendet:

$$\begin{aligned} V_W &= V_{00} - V_{0\sigma} - V_{0\tau} + V_{0\sigma\tau} && \text{(Wignerkraft)},\\ V_M &= -4\,V_{0\sigma\tau} && \text{(Majoranakraft)},\\ V_B &= 2\,V_{0\sigma} - 2\,V_{0\sigma\tau} && \text{(Bartlettkraft)},\\ V_H &= -2\,V_{0\tau} + 2\,V_{0\sigma\tau} && \text{(Heisenbergkraft)}. \end{aligned} \tag{IV.24}$$

b) *Projektionsoperatoren.* Die Projektionsoperatoren

$$\begin{aligned} \Pi_s &= |s\rangle\langle s|, \quad \Pi_t = |t\rangle\langle t|,\\ \Pi_o &= |o\rangle\langle o|, \quad \Pi_e = |e\rangle\langle e| \end{aligned} \tag{IV.25}$$

(die Buchstaben s, t, e, o beziehen sich auf singulett, triplett, even und odd) genügen folgenden Vollständigkeitsrelationen:

$$\begin{aligned} \Pi_s^\sigma + \Pi_t^\sigma &= 1,\\ \Pi_s^\tau + \Pi_t^\tau &= 1,\\ \Pi_e^r + \Pi_o^r &= 1. \end{aligned} \tag{IV.26}$$

Aus dem Pauliprinzip ergibt sich eine weitere Vollständigkeitsrelation, die die Beschränkung auf antisymmetrische Produkte ausdrückt:

$$\Pi_e^r \Pi_t^\sigma \Pi_s^\tau + \Pi_e^r \Pi_s^\sigma \Pi_t^\tau + \Pi_o^r \Pi_t^\sigma \Pi_t^\tau + \Pi_o^r \Pi_s^\sigma \Pi_s^\tau = 1. \tag{IV.27}$$

Der Zusammenhang mit den Austauschoperatoren ist, wie man durch Anwendung auf einen entsprechenden Zustand leicht sieht, gegeben durch:

$$\begin{aligned} \Pi_t &= \tfrac{1}{2}(1 + P_{12}),\\ \Pi_s &= \tfrac{1}{2}(1 - P_{12}). \end{aligned} \tag{IV.28}$$

Der Zentralkraftanteil von (IV.19) wird üblicherweise wie folgt ausgedrückt:

$$v(1,2) = V_{et}\,\Pi_e^r \Pi_t^\sigma + V_{es}\,\Pi_e^r \Pi_s^\sigma + V_{ot}\,\Pi_o^r \Pi_t^\sigma + V_{os}\,\Pi_o^r \Pi_s^\sigma. \tag{IV.29}$$

Bei der Anwendung auf Zustände bestimmter Symmetrie ist diese Form besonders nützlich. (So treten z. B. in der p-p-Streuung wegen des notwendigen Isospintripletts nur $|es\rangle$ und $|ot\rangle$ auf, wodurch die Anpassung der Koeffizienten erleichtert wird.)

In folgender Tabelle kann man die Wirkung von $v(1,2)$ auf die einzelnen Symmetrieanteile eines Zustandes und gleichzeitig die Beziehungen zwischen den verschiedenen Koeffizienten ablesen:

$\sigma^{(1)}\cdot\sigma^{(2)}$	$\tau^{(1)}\cdot\tau^{(2)}$	$v(\sigma^{(1)}\cdot\sigma^{(2)},\tau^{(1)}\cdot\tau^{(2)})$	$v(P^r_{12},P^\sigma_{12})$	$v(\Pi^r,\Pi^\sigma)$	$\|12\rangle$
1	-3	$V_{00}+V_{0\sigma}-3V_{0\tau}-3V_{0\sigma\tau}$	$V_W+V_M+V_B+V_H$	V_{et}	$\|et\rangle$
-3	1	$V_{00}-3V_{0\sigma}+V_{0\tau}-3V_{0\sigma\tau}$	$V_W+V_M-V_B-V_H$	V_{es}	$\|es\rangle$
1	1	$V_{00}+V_{0\sigma}+V_{0\tau}+V_{0\sigma\tau}$	$V_W-V_M+V_B-V_H$	V_{ot}	$\|ot\rangle$
-3	-3	$V_{00}-3V_{0\sigma}-3V_{0\tau}+9V_{0\sigma\tau}$	$V_W-V_M-V_B+V_H$	V_{os}	$\|os\rangle$

(IV.30)

Ortsabhängigkeit der Zentralkräfte. Alle oben eingeführten Koeffizienten V können noch Funktionen des Abstandes $r_{12}=r$ sein. Über diese Abhängigkeit sagen die allgemeinen Invarianzprinzipien nichts aus. 1935 schlug Yukawa vor, die Kernkräfte aus einer Mesonenfeldtheorie abzuleiten. Dieser Methode war jedoch bis heute kein endgültiger und quantitativer Erfolg beschieden. Trotzdem wird häufig das sich aus dieser Theorie (siehe z.B. Hulthén, Sugawara [HS 57], S. 14ff.) ergebende *Yukawapotential*

$$V(r)=V_0\,\frac{\exp(-r/r_0)}{r/r_0} \qquad \text{(IV.31)}$$

für numerische Rechnungen verwendet. Der Reichweiteparameter r_0 und die Potentialtiefe $-V_0$ werden an das empirische Datenmaterial angepaßt und sind von der Größenordnung 1 bis 2 fm beziehungsweise 50 MeV. (In der Mesonenfeldtheorie erhält man für r_0 den Wert 1,4 fm). Es hat sich herausgestellt, daß numerische Ergebnisse nicht sehr von der Form von $V(r)$ abhängen, so daß auch häufig folgende Potentiale benutzt werden:

$$V(r)=V_0\exp(-r^2/r_0^2) \qquad \text{(Gauß-Potential),} \qquad \text{(IV.32a)}$$

$$V(r)=V_0\,\frac{\exp(-r/r_0)}{1-\exp(-r/r_0)} \qquad \text{(Hulthén-Potential),} \qquad \text{(IV.32b)}$$

$$V(r)=V_0\,\delta(r) \qquad \text{(Kontaktpotential).} \qquad \text{(IV.32c)}$$

Alle diese Potentiale sind jedoch nicht brauchbar zur Erklärung der Streudaten von Nukleonen sehr hoher Energie (einige hundert MeV). Dazu muß man, wenn man die Kräfte als impulsunabhängig ansetzt, annehmen, daß das Potential für sehr kurze Abstände (etwa 0,4 fm) zweier Nukleonen sehr stark abstoßend wirkt, d. h. einen harten Kern (hard core) besitzt. Der Verlauf eines solchen hard core-Potentials ist in Fig. 28 veranschaulicht.



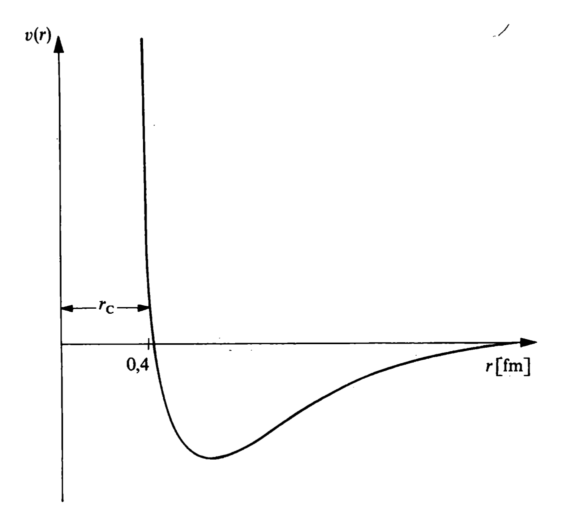


Fig. 28 Nukleon-Nukleon-Potential mit abstoßendem Kern.

Der hard core ist auch hinreichend zur Erklärung der Sättigung der Kernkräfte. Ändert sich nämlich die Kerndichte als Funktion der Massenzahl A auf Grund des abstoßenden hard core nur wenig, so tritt wegen der kurzen Reichweite des anziehenden Teils der Kräfte jedes Nukleon unabhängig von A nur mit einer ganz bestimmten Anzahl anderer in Wechselwirkung, und die Bindungsenergie pro Teilchen ist somit näherungsweise für schwerere Kerne konstant (Fig. 29) (s. a. Landau, Lifschitz [LL 65], S. 462).

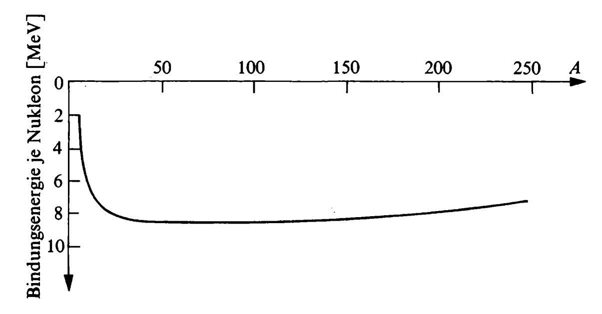


Fig. 29 Sättigung der Bindungsenergie pro Nukleon in Abhängigkeit vom Atomgewicht.

Zur Erklärung der Sättigung ist der hard core allerdings nicht notwendig, wenn man den freien Potentialparametern bestimmte Sättigungsbedingungen auferlegt ([LL 65], S. 462f.).

Zur Bestimmung der ortsabhängigen Koeffizienten V in (IV.30) nimmt man an, daß alle dieselbe funktionale Gestalt, jedoch verschiedene Stärke besitzen. Von verschiedenen Autoren wurde jeweils ein Satz von vier Parametern (Mischungen) an empirische Daten angepaßt. Welcher Mischung bei numerischen Rechnungen der Vorzug zu geben ist, soll hier nicht näher diskutiert werden und muß von Fall zu Fall entschieden werden. Schreibt man die Zentralkraft in folgender Form

$$v(1,2) = V_0(a_{\mathrm{et}}\,\Pi^r_{\mathrm{e}}\,\Pi^\sigma_{\mathrm{t}} + a_{\mathrm{es}}\,\Pi^r_{\mathrm{e}}\,\Pi^\sigma_{\mathrm{s}} + a_{\mathrm{ot}}\,\Pi^r_{\mathrm{o}}\,\Pi^\sigma_{\mathrm{t}} + a_{\mathrm{os}}\,\Pi^r_{\mathrm{o}}\,\Pi^\sigma_{\mathrm{s}})\,f(r,r_0)\,, \tag{IV.33}$$

so erhält man die in Tab. 6 angegebenen Mischungen.

Tab. 6 Koeffizienten der Austauschmischungen.

Mischung	a_{et}	a_{es}	a_{ot}	a_{os}
Wigner	1	1	1	1
Serber	1	1	0	0
Rosenfeld	1	0,6	−0,34	−1,78
Ferrell-Visscher	1	0.634	−0,366	0
Soper	1	0,46	0,14	−0,4
Gillet	1	0,6	−0,6	0,6

Typische Werte für die Stärke V_0 und die Reichweite r_0 sind (siehe z.B. Ferrell, Visscher [FV 57]):

$$V_0 = -51{,}9\ \mathrm{MeV}, \quad r_0 = 1{,}732\ \mathrm{fm}. \tag{IV.34}$$

Tensorkräfte. Der zweite Anteil von (IV.19) wird als Potential einer Tensorkraft bezeichnet und hat die Form:

$$v_{\mathrm{T}}(1,2) = \left\{\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2} - \frac{1}{3}\,\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\right\}\ (V_{10} + V_{1\tau}\,\boldsymbol{\tau}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\tau}^{(2)}). \tag{IV.35}$$

Der Term $-\frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ wird hinzugefügt, damit $v_{\mathrm{T}}(1,2)$ gemittelt über alle Richtungen von $\boldsymbol{r}_{12}$ verschwindet:

$$\int v_{\mathrm{T}}(1,2)\,\mathrm{d}\Omega_{12} = 0, \quad \boldsymbol{r}_{12} = \{r_{12}, \Omega_{12}\}. \tag{IV.36}$$

Man spricht vom Potential einer *Tensorkraft*, da sich $v_T(1,2)$ wie ein Tensor transformiert:

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot \boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot \boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2} - \frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)} = \sum_{i,j=1}^{3} \sigma_i^{(1)}\sigma_j^{(2)}\left(1 - \frac{1}{3}\delta_{ij}\right)\frac{r_{12}^i r_{12}^j}{r_{12}^2}. \quad \text{(IV.37)}$$

Einen experimentellen Hinweis für das Auftreten der Tensorkraft liefert u.a. das Quadrupolmoment des Deuterons, das eine kugelsymmetrische Zentralkraft nicht zu erklären vermöchte.

Ein Potential, das sich aus Zentral-, Tensor- und Spin-Bahn-Anteilen zusammensetzt und sowohl die Nukleon-Nukleon-Streudaten unterhalb 315 MeV als auch die Eigenschaften des Deuterons befriedigend zu erklären vermag, wurde von Hamada und Johnston [HJ 62] angegeben.

4. Nichtlokale Kräfte

Um die allgemeinste Form nichtlokaler Kräfte studieren zu können, betrachten wir einen Potentialoperator V angewendet auf einen Zustand $|\ \rangle$:

$$\langle \boldsymbol{r}|V|\ \rangle = \int \langle \boldsymbol{r}|V|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\ \rangle \mathrm{d}^3 r = \int V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3 r. \quad (IV.38)$$

Hat $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ die Form

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = V(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \quad \text{(IV.39a)}$$

so heißt V lokal, und (IV.38) vereinfacht sich zu:

$$\langle \boldsymbol{r}|V|\ \rangle = V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}). \quad \text{(IV.39b)}$$

Im allgemeinen gehen jedoch auch noch die Werte der Wellenfunktion ψ in einer Umgebung $\boldsymbol{r}'$ von $\boldsymbol{r}$ ein. Solche Potentiale heißen nichtlokal.

Die Nichtlokalität eines Potentials ist einer Impulsabhängigkeit äquivalent. Hierzu entwickelt man $\psi(r')$ (zur Vereinfachung wird ein eindimensionales Analogon betrachtet) um die Stelle r nach Potenzen von $r'-r$:

$$\begin{aligned}\psi(r') &= \psi(r) + (r'-r)\frac{\partial}{\partial r}\psi(r) + \frac{(r'-r)^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi(r) + \cdots \\ &= \mathrm{e}^{(r'-r)\frac{\partial}{\partial r}}\psi(r) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(r'-r)p}\psi(r).\end{aligned} \quad \text{(IV.40)}$$

Setzt man (IV.40) in (IV.38) ein, so ergibt sich:

$$\langle r|V|\rangle = \int V(r,r')\,e^{\frac{i}{\hbar}(r'-r)p}\,dr'\,\psi(r) = \tilde{V}(r,p)\,\psi(r). \qquad \text{(IV.41)}$$

Eine explizite Nichtlokalität in den Ortskoordinaten in v,

$$v(\mathit{11'}.\mathit{22'}) \equiv v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}'_1,\boldsymbol{r}'_2,\boldsymbol{\sigma}^{(1)},\boldsymbol{\sigma}^{(2)},\boldsymbol{\tau}^{(1)},\boldsymbol{\tau}^{(2)}), \qquad \text{(IV.42)}$$

führt zu folgenden Verallgemeinerungen[1] der Resultate von Abschnitt 2:

Die *Translationsinvarianz* verlangt, daß $v(\mathit{1},\mathit{2})$ nur von folgenden Kombinationen der Ortsvektoren abhängt:

$$\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{r}'_1-\boldsymbol{r}'_2, \quad (\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)-(\boldsymbol{r}'_1+\boldsymbol{r}'_2). \qquad \text{(IV. 43)}$$

Da aufgrund der *Galileiinvarianz* $v(\mathit{1},\mathit{2})$ nur vom Relativimpuls abhängen darf, folgt mit

$$(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)-(\boldsymbol{r}'_1+\boldsymbol{r}'_2)=2(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}')$$

und (IV.41), daß $v(\mathit{1},\mathit{2})$ nur eine Funktion der Relativkoordinaten

$$\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{r}_{12}, \quad \boldsymbol{r}'_1-\boldsymbol{r}'_2=\boldsymbol{r}'_{12} \qquad \text{(IV.44)}$$

sein kann.

Die aus der Isotropie des Raumes folgende Forderung der *Drehinvarianz* des Potentials wird nur durch die Kombinationen

$$\begin{aligned}
&r_{12}, \quad r'_{12}, \quad \boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{r}'_{12},\\
&\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)},\\
&(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}_{12}), \quad (\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}'_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}'_{12}),\\
&(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}'_{12})+(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{r}'_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\cdot\boldsymbol{r}_{12}),\\
&(\boldsymbol{r}_{12}\times\boldsymbol{r}'_{12})\cdot(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})
\end{aligned} \qquad \text{(IV.45)}$$

erfüllt bzw. durch solche, die auf (IV.45) zurückgeführt werden können.

Alle Terme von (IV.45) sind *zeitspiegelungsinvariant*, falls der Koeffizient vor $(\boldsymbol{r}_{12}\times\boldsymbol{r}'_{12})\cdot(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})$ rein imaginär ist (s. Definition des Zeitspiegelungsoperators [Me 61], S. 664ff.).

Die übrigen Invarianzforderungen von Abschnitt 2 werden von (IV.45) erfüllt.

Hiermit ergibt sich schließlich die allgemeinste Form eines nichtlokalen Potentials, die mit allen Erfahrungssätzen verträglich ist:

[1] Es muß betont werden, daß bereits Kräfte der Form (IV.19) im allgemeinen nichtlokalen Charakter haben, da sich z.B. die Wirkung des Ortsaustauschoperators P^r_{12} in folgender Weise darstellen läßt:

$$v(r_{12})P^r_{12}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\int v(r_{12})\delta(\boldsymbol{r}'_1-\boldsymbol{r}_2)\delta(\boldsymbol{r}'_2-\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}'_1,\boldsymbol{r}'_2)\,d^3r'_1\,d^3r'_2.$$

Nur Wignerkräfte sind streng lokal (vgl. auch (IV.23)).

$$\begin{aligned}v(11',22') = {} & v_0 + v_\sigma \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} + v_{\mathrm{SB}}(\boldsymbol{r}_{12} \times \boldsymbol{r}'_{12}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)}) \\ & + v_{1\mathrm{T}} \left\{ \frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2} - \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \right\} \\ & + v_{2\mathrm{T}} \left\{ \frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}'_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}'_{12})}{r'^2_{12}} - \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \right\} \\ & + v_{3\mathrm{T}} \left\{ \frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}'_{12}) + (\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{r}'_{12})(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \boldsymbol{r}_{12})}{\boldsymbol{r}_{12} \cdot \boldsymbol{r}'_{12}} - \frac{2}{3} \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \right\}. \end{aligned} \quad \text{(IV.46a)}$$

Dabei hat jeder der von $\boldsymbol{r}_{12} \cdot \boldsymbol{r}'_{12}, r_{12}^2, r'^2_{12}$ abhängigen Koeffizienten v_i die Form:

$$v_i = v_{i0} + v_{i\tau} \boldsymbol{\tau}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\tau}^{(2)}. \quad \text{(IV.46b)}$$

Die Koeffizienten v_0, v_σ bestimmen die Zentralkräfte, $v_{1\mathrm{T}}, v_{2\mathrm{T}}, v_{3\mathrm{T}}$ die Tensorkräfte.

Nichtlokalität und Spin-Bahn-Kraft. Man kann zeigen, daß der dritte Term von (IV.46a) unter bestimmten Voraussetzungen einer Spin-Bahn-Kraft äquivalent ist. Mit den Abkürzungen $\boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}'_{12} = \boldsymbol{r}'$, $\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r} = \boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r} | V_{\mathrm{SB}} | \rangle & \equiv -\mathrm{i} \int [(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{r}') \cdot \boldsymbol{\sigma}] v_{\mathrm{SB}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \psi(\boldsymbol{r}') \mathrm{d}^3 r' \\ & = -\mathrm{i} \int [(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] v_{\mathrm{SB}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}) \psi(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{q}) \mathrm{d}^3 q. \end{aligned} \quad \text{(IV.47)}$$

Unter der Annahme einer Fastlokalität dieses Potentials ($V_{\mathrm{SB}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q})$ ist nur für kleine $\boldsymbol{q}$ wesentlich von Null verschieden) kann man $\psi(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{q})$ in eine Taylorreihe um $\boldsymbol{q} = 0$ entwickeln und diese nach dem 2. Glied abbrechen:

$$\psi(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{q}) \simeq \psi(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{q} \cdot \nabla) \psi(\boldsymbol{r}) + \cdots. \quad \text{(IV.48)}$$

Mit (IV.47) und $\boldsymbol{r} \equiv z \cdot \boldsymbol{e}_3$ gilt:

$$\begin{aligned} & \int [(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] v_{\mathrm{SB}}(r, q, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3 q = \\ & \int [z \boldsymbol{e}_3 \times (q_1 \boldsymbol{e}_1 + q_2 \boldsymbol{e}_2 + q_3 \boldsymbol{e}_3)] \cdot \boldsymbol{\sigma} v_{\mathrm{SB}} (|z|, (\sum_{i=1}^{3} q_i^2)^{1/2}, z q_3) \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 \mathrm{d}q_3 = 0, \end{aligned} \quad \text{(IV.49)}$$

da der Integrand ungerade in q_1 und q_2 ist.

Mit (IV.48) und (IV.49) folgt für (IV.47):

$$\langle \boldsymbol{r} | V_{\mathrm{SB}} | \rangle = \int [(\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{q}] v_{\mathrm{SB}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}) (\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{k}) \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3 q, \quad \text{(IV.50a)}$$

wobei

$$\boldsymbol{k} = -\mathrm{i} \nabla \quad \text{(IV.50b)}$$

gesetzt wurde. Legt man $\boldsymbol{r}$ wieder in die z-Richtung, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}|V_{SB}|\rangle &= \int [(\boldsymbol{\sigma}\times z\,\boldsymbol{e}_3)\cdot\boldsymbol{q}]\, v_{SB}(|z|, q, z q_3)(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 q \\ &= \sum_{i,j=1}^{3}\int q_i q_j v_{SB}\,\Big(|z|, \big(\sum_{i=1}^{3} q_i^2\big)^{1/2}, z q_3\Big)\,(\boldsymbol{\sigma}\times z\,\boldsymbol{e}_3)_i k_j \psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 q\end{aligned} \tag{IV.51}$$

Da $(\boldsymbol{\sigma}\times z\,\boldsymbol{e}_3)_3$ Null ist, verschwindet das Glied mit $i=j=3$. Die Terme mit $i\neq j$ verschwinden, da jeweils ein Integrand des 3-fach-Integrals über $\boldsymbol{q}$ in kartesischen Koordinaten ungerade ist. Es folgt somit:

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}|V_{SB}|\rangle &= \int q_x^2\, v_{SB}(r, q, \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3 q\,(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{k}\,\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= f(r)\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\psi(\boldsymbol{r}).\end{aligned} \tag{IV.52}$$

Die starken Spin-Bahn-Wechselwirkungen zwischen den Nukleonen rühren also möglicherweise von der Nichtlokalität der Kernkräfte her.

Zusammenfassung. Wir haben die allgemeinste Form der Kernkräfte angegeben, die mit allgemeingültigen Invarianzen verträglich ist. Da eine abgeschlossene Theorie der starken Wechselwirkung fehlt, werden wir bei allen über das Schalenmodell hinausgehenden Rechnungen solche Kräfte benützen.

V. DAS HARTREE-FOCK-VERFAHREN

1. Einführung

Die Vorstellung, daß sich ein Nukleon im mittleren Potential aller übrigen bewegt, ist durch den Erfolg des phänomenologisch eingeführten Schalenmodells erhärtet worden. Es erhebt sich nun die Frage, in welcher Weise aus einer Summe von Zweiteilchenwechselwirkungen

$$V(1,\dots,A) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i<j)}}^{A} v(i,j) \tag{V.1}$$

eine Summe von Einteilchenpotentialen

$$V(1,\dots,A) = \sum_{i=1}^{A} V(i) \tag{V.2}$$

extrahiert werden kann und inwieweit diese mit den früher verwendeten Einteilchenpotentialen wie Oszillator-, Kasten- und Woods-Saxon-Potential übereinstimmen. Es wird sich zeigen, daß man das Einteilchenpotential aus der Zweiteilchenwechselwirkung durch das Hartree-Fock-Variationsverfahren herleiten kann, indem man für die exakte A-Teilchenwellenfunktion eine Slaterdeterminante ansetzt und nach den Einteilchenwellenfunktionen variiert.

Wir werden in Abschnitt 2 die allgemeine Form eines Variationsverfahrens diskutieren, da wir auch in späteren Kapiteln immer wieder solche Verfahren benutzen müssen. In Abschnitt 3 wird in diesem Rahmen dann das Hartree-Fock-Problem behandelt.

2. Allgemeines Variationsverfahren

Wir wollen zunächst die Äquivalenz der exakten Schrödingergleichung

$$\mathrm{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{V.3}$$

und der Variationsgleichung

$$\delta E[\Psi] = 0, \tag{V.4a}$$

$$E[\Psi] = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \tag{V.4b}$$

als Bestimmungsgleichungen für die Zustandsvektoren $|\Psi\rangle$ zeigen. Ein Zustandsvektor, der das Funktional $E[\Psi]$ stationär macht, ist demnach gleichzeitig auch Lösung der Schrödingergleichung. Die Variation in (V.4a) läßt sich mit (V.4b) ausführen:

$$\langle\delta\Psi|H-E|\Psi\rangle+\langle\Psi|H-E|\delta\Psi\rangle=0. \qquad \text{(V.5)}$$

Zunächst sind $|\delta\Psi\rangle$ und $\langle\delta\Psi|$ keine voneinander unabhängigen Variationen. Da Gleichung (V.5) aber für jedes beliebige $|\delta\Psi\rangle$ gilt, solange dieses nur infinitesimal ist, können wir statt $|\delta\Psi\rangle$ auch $\mathrm{i}|\delta\Psi\rangle$ setzen:

$$-\mathrm{i}\langle\delta\Psi|H-E|\Psi\rangle+\mathrm{i}\langle\Psi|H-E|\delta\Psi\rangle=0. \qquad \text{(V.6)}$$

Multipliziert man (V.5) mit i und addiert bzw. subtrahiert Gleichung (V.6), dann folgen die Beziehungen:

$$\langle\delta\Psi|H-E|\Psi\rangle=0, \quad \langle\Psi|H-E|\delta\Psi\rangle=0 \qquad \text{(V.7)}$$

oder

$$(H-E[\Psi])|\Psi\rangle=0, \quad (H^\dagger-E^*[\Psi])|\Psi\rangle=0. \qquad \text{(V.8)}$$

Wegen der Hermitezität von H ist (V.8) gleichbedeutend mit (V.3), d.h. das Aufsuchen des Minimums von $E[\Psi]$ entspricht der Lösung der Schrödingergleichung.

Zur näherungsweisen Berechnung von E und $|\Psi\rangle$ aus (V.4) geht man so vor, daß man aus dem Variationsraum F, der der exakten Lösung der Schrödingergleichung entspricht, einen mathematisch einfach zu behandelnden Teilraum $\hat{F}$ auswählt, wobei man hofft, daß die Variation in $\hat{F}$ einen Zustand liefert, der den exakten möglichst gut approximiert. Die zu $\hat{F}$ gehörende Testwellenfunktion wird im folgenden mit $|\hat{\Psi}\rangle$ bezeichnet. Das Variationsverfahren eignet sich besonders zur Berechnung des Grundzustandes, da hierbei für jedes beliebige $|\hat{\Psi}\rangle$

$$E[\hat{\Psi}]\geqslant E_0 \qquad \text{(V.9)}$$

gilt, $E[\Psi]$ also immer eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie liefert. Mit

$$H|\Psi_n\rangle=E_n|\Psi_n\rangle \qquad \text{(V.10)}$$

können wir nämlich $|\hat{\Psi}\rangle$ nach $|\Psi_n\rangle$ entwickeln:

$$|\hat{\Psi}\rangle=\sum_n a_n|\Psi_n\rangle. \qquad \text{(V.11)}$$

Damit folgt:

$$E[\hat{\Psi}] = \frac{\sum\limits_{nn} a_n^* a_{n'} E_n \delta_{nn'}}{\sum\limits_n |a_n|^2} \geqslant \frac{\sum\limits_n |a_n|^2 E_0}{\sum\limits_n |a_n|^2} = E_0. \tag{V.12}$$

Um aus der Bedingung (V.4) die Wellenfunktion $|\hat{\Psi}_1\rangle$ und die Energie E_1 des auf den Grundzustand folgenden ersten angeregten Zustandes zu erhalten, darf man als Testfunktionen nur solche zulassen, die auf dem Grundzustand senkrecht stehen. Wenn allgemein die Wellenfunktionen $\hat{\Psi}_0, \hat{\Psi}_1, \ldots, \hat{\Psi}_{n-1}$ der ersten n Zustände bekannt sind (die Zustände sind nach wachsenden Energien geordnet), dann bestimmt man die Wellenfunktion des folgenden Zustandes aus der Bedingung (V.4) unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen

$$\langle \hat{\Psi}_n | \hat{\Psi}_n \rangle = 1, \quad \langle \hat{\Psi}_n | \hat{\Psi}_m \rangle = 0 \text{ für } m = 0,1,2,\ldots,n-1, \tag{V.13}$$

die man mit Lagrangeparametern ankoppelt.

3. Das Variationsverfahren zur Ableitung der Hartree-Fock-Gleichungen

Wahl von $\hat{F}$. Zur Bestimmung der A-Teilchentestwellenfunktion benützen wir die Tatsache, daß das Schalenmodell des Kerns eine brauchbare Näherung zum qualitativen Verständnis der Experimente liefert. Wir werden demnach für $\hat{F}$ einen Raum wählen, der von antisymmetrisierten Produktzuständen $|\hat{\Psi}\rangle$ aufgespannt wird:

$$\left\{ \sum_{i=1}^{A} h_i \right\} \hat{\Psi}(1,\ldots,A) = E\,\hat{\Psi}(1,\ldots,A), \tag{V.14}$$

$$\hat{\Psi}(1,\ldots,A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det|\varphi_i(j)|, \tag{V.15}$$

$$\begin{aligned} &h_j \varphi_i(j) = \varepsilon_i \varphi_i(j), \\ &j = \{\boldsymbol{r}_j, s_j, \vartheta_j\}. \end{aligned} \tag{V.16}$$

Der A-Teilchengrundzustand ist in dieser Näherung dadurch gegeben, daß die A tiefsten Einteilchenniveaus besetzt sind. Die niedrigste Energie werden wir nach (V.9) durch Variation der Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(j)$ in (V.7) erhalten:

$$\delta \langle \hat{\Psi} | H - E | \hat{\Psi} \rangle = 0. \tag{V.17}$$

Die Hartree-Fock-Gleichungen in der Besetzungszahldarstellung. Die Auswertung von (V.17) vereinfacht sich gegenüber der Ortsdarstellung stark mit den Methoden der Feldquantisierung (s. Anhang I). Definieren wir nämlich Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_i^\dagger$ und a_i, die ein Nukleon im Zustand i erzeugen bzw. vernichten und folgenden Plus-Vertauschungsrelationen genügen

$$\begin{aligned}\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} &= \{a_i, a_j\} = 0, \\ \{a_i, a_j^\dagger\} &= \delta_{ij},\end{aligned} \qquad (\text{V.18})$$

so schreibt sich ein antisymmetrierter A-Teilchenproduktzustand:

$$\hat{\Psi}(1,\ldots,A) = \prod_{i=1}^{A} a_i^\dagger |0\rangle_0. \qquad (\text{V.19})$$

$|0\rangle_0$ ist hierbei das „Vakuum" (Zustand ohne Teilchen).
Der Hamiltonoperator des Kerns ist in zweiter Quantisierung gegeben durch (s. Anhang I):

$$H = \sum_{k_1 k_2} \langle k_1|t|k_2\rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \tfrac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \sum_{k_1' k_2'} \langle k_1 k_2|v|k_1' k_2'\rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_2'} a_{k_1'} \qquad (\text{V.20})$$

$$= \sum_{k_1 k_2} \langle k_1|t|k_2\rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \tfrac{1}{4} \sum_{k_1 k_2} \sum_{k_1' k_2'} \langle k_1 k_2|\bar{v}|k_1' k_2'\rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_2'} a_{k_1'}, \qquad (\text{V.21})$$

$$\langle k_1 k_2|\bar{v}|k_1' k_2'\rangle = \langle k_1 k_2|v|k_1' k_2'\rangle - \langle k_1 k_2|v|k_2' k_1'\rangle. \qquad (\text{V.22})$$

Wir müssen noch angeben, in welcher Weise die Variation nach den Einteilchenzuständen in (V.17) erfolgen soll. Um aus dem Variationsprinzip (V.17) die „besten" Einteilchenzustände zu gewinnen, mischt man den in $|\hat{\Psi}\rangle$ besetzten Einteilchenzuständen infinitesimal andere Einteilchenzustände bei, die wegen des Pauliprinzips oberhalb der Fermikante liegen müssen. Ausgedrückt durch Feldoperatoren lautet damit $|\delta\hat{\Psi}\rangle$:

$$|\delta\hat{\Psi}\rangle = \sum_{mi} \eta_{mi} a_m^\dagger a_i |\hat{\Psi}\rangle \qquad (\text{V.23})$$

i bezieht sich auf besetzte, m auf unbesetzte Zustände. Beachtet man, daß $a_m|\hat{\Psi}\rangle = 0$, so schreibt sich (V.7):

$$\sum_{mi} \eta_{mi} \langle\hat{\Psi}|a_i^\dagger a_m H|\hat{\Psi}\rangle = 0. \qquad (\text{V.24})$$

Nach Auswertung von (V.24) mit den in Anhang I angegebenen Rechenregeln erhält man (die η_{mi} sind beliebige infinitesimale Größen):

$$\langle m|t|i\rangle + \sum_{j=1}^{A} \langle jm|v|ji\rangle - \langle jm|v|ij\rangle = 0, \quad (i \leqslant A,\ m > A). \qquad (\text{V.25})$$

Den Einteilchenanteil des exakten Hamiltonoperators (V.21)

$$H_{\mathrm{HF}} = \sum_{\substack{l\,k \\ \text{(unbeschränkt)}}} \left\{ \langle k|t|l\rangle + \sum_{j=1}^{A} \langle j\,k|\bar{v}|j\,l\rangle \right\} a_k^\dagger a_l \qquad \text{(V.26)}$$

wollen wir als den selbstkonsistenten Hartree-Fock-Hamiltonoperator bezeichnen. Wegen (V.25) erstreckt sich die Doppelsumme in (V.26) entweder nur über besetzte oder nur über unbesetzte Zustände $|k\rangle$ und $|l\rangle$. Damit ist der Unterraum der besetzten Niveaus vom Unterraum der unbesetzten Niveaus entkoppelt, und H_{HF} kann in beiden Unterräumen getrennt diagonalisiert werden:

$$\langle\mu|t|\lambda\rangle + \sum_{\kappa=1}^{A} \langle\kappa\,\mu|\bar{v}|\kappa\,\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda\,\delta_{\lambda\mu} \qquad \text{(V.27)}$$

oder

$$H_{\mathrm{HF}} = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda\, a_\lambda^\dagger a_\lambda . \qquad \text{(V.28)}$$

Der antisymmetrisierte Produktzustand $|\mathrm{HF}\rangle$, der aus den A niedrigsten Einteilchenzuständen $|\lambda\rangle$ der neuen Basis gebildet wird, liefert in diesem Rahmen den tiefstmöglichen Grundzustand, da (V.27) eine unmittelbare Konsequenz der Minimalisierungsbedingung (V.4) ist.

Die HF-Gleichungen in Ortsdarstellung. Um den physikalischen Inhalt der Hartree-Fock-Gleichungen besser diskutieren zu können, transformieren wir (V.27) unter der Annahme eines lokalen Zweiteilchenpotentials v_{ij} (Wignerkraft) in den Ortsraum:

$$\int \varphi_\mu^*(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) \varphi_\mu(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3r + \sum_{\kappa=1}^{A} \int \{\varphi_\kappa^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_\mu^*(\boldsymbol{r}_2) v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\varphi_\kappa(\boldsymbol{r}_1)\varphi_\mu(\boldsymbol{r}_2)$$

$$-\varphi_\kappa^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_\mu^*(\boldsymbol{r}_2) v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\varphi_\kappa(\boldsymbol{r}_2)\varphi_\mu(\boldsymbol{r}_1)\}\,\mathrm{d}^3r_1\,\mathrm{d}^3r_2 = \varepsilon_\mu . \qquad \text{(V.29)}$$

Führt man folgende Definitionen ein:

$$V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\kappa=1}^{A} \int v(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|\varphi_\kappa(\boldsymbol{r}')|^2\,\mathrm{d}^3r', \qquad \text{(V.30a)}$$

$$V_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \sum_{\kappa=1}^{A} v(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})\varphi_\kappa^*(\boldsymbol{r}')\varphi_\kappa(\boldsymbol{r}), \qquad \text{(V.30b)}$$

so sieht man, daß man $\varphi_\mu(\boldsymbol{r})$ als Lösung einer Schrödingergleichung der Form

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_\mathrm{H}(\boldsymbol{r})\right\}\varphi_\mu(\boldsymbol{r}) + \int V_\mathrm{F}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\varphi_\mu(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' = \varepsilon_\mu\varphi_\mu(\boldsymbol{r}) \qquad \text{(V.31)}$$

auffassen kann.

Die Gleichung (V.31) beinhaltet ein Selbstkonsistenzproblem, da die Potentiale (V.30a, b), aus denen sich die Zustände bestimmen, ihrerseits wieder von diesen Zuständen abhängen. Die vollständige Lösung des Variationsverfahrens besteht demnach in einer Iteration von (V.31), wobei man beispielsweise im 1. Schritt von phänomenologischen Schalenmodellwellenfunktionen ausgehen kann, mit denen man V_H und V_F berechnet. Aus (V.31) erhält man dann neue Einteilchenwellenfunktionen usf., bis sich zwei aufeinander folgende Iterationsschritte nicht mehr unterscheiden. V_H und V_F sind also die *selbstkonsistenten* mittleren Potentiale, die ein Teilchen auf Grund der Wechselwirkung mit allen anderen spürt.

Besonders auffällig ist, daß der selbstkonsistente Einteilchenhamiltonoperator ein nichtlokales Potential enthält. Bei Durchführung des Variationsverfahrens in Ortsdarstellung ([Me 61], S. 773) sieht man, daß dieser nichtlokale Anteil des Hartree-Fock-Potentials vom Pauliprinzip herrührt. Variiert man nämlich eine nichtantisymmetrische Produktwellenfunktion (Hartree-Verfahren), so fehlt dieser nichtlokale sogenannte „Fock-" oder Austausch-Term (nichtlokale Zweiteilchenkräfte führen schon im Hartree-Term zu einer Nichtlokalität).

Berechnung der Gesamtenergie. Die Grundzustandsenergie E_0^HF eines Systems aus A Nukleonen lautet in Hartree-Fock-Näherung:

$$E_0^\mathrm{HF} = \langle \mathrm{HF}|H|\mathrm{HF}\rangle. \qquad \text{(V.32)}$$

Mit

$$|\mathrm{HF}\rangle = \prod_{\kappa=1}^{A} a_\kappa^\dagger |0\rangle_0 \qquad \text{(V.33)}$$

und (V.21) folgt für E_0^HF:

$$\begin{aligned} E_0^\mathrm{HF} &= \sum_{\kappa=1}^{A}\langle\kappa|t|\kappa\rangle + \tfrac{1}{2}\sum_{\kappa,\lambda=1}^{A}\langle\kappa\lambda|\bar{v}|\kappa\lambda\rangle \\ &= \sum_{\kappa=1}^{A}\varepsilon_\kappa - \tfrac{1}{2}\sum_{\kappa,\lambda=1}^{A}\langle\kappa\lambda|\bar{v}|\kappa\lambda\rangle. \end{aligned} \qquad \text{(V.34)}$$

E_0^HF bestimmt sich also nicht als Summe der Hartree-Fock-Einteilchenenergien.

Diskussion der Hartree-Fock-Methode. Bis vor einiger Zeit gab es im Atomkern keine selbstkonsistenten Berechnungen von Einteilchenzuständen nach der HF-Methode. Man verwendete vielmehr die phänomenologischen Potentiale, wie z. B. Kasten-, Oszillator- und Saxon-Woods-Potential als ad-hoc-Näherungen für das selbstkonsistente Hartree-Fock-Potential. In diesem Sinne sollen in Zukunft auch diese Einteilchenpotentiale, wenn von ihnen die Rede sein wird, verstanden werden.

Neben einer Reihe anderer Autoren haben inzwischen z. B. Muthukrishnan und Baranger [MB 65] sowie Davies et al. [Da 66] selbstkonsistente Rechnungen durchgeführt, die die Verwendbarkeit phänomenologischer Schalenmodellpotentiale zu bestätigen scheinen (vgl. auch Ripka [Ri 65]).

VI. KOLLEKTIVE SCHWINGUNGSZUSTÄNDE

1. Einleitung

Einer der wichtigsten experimentellen Schlüssel, dessen richtiger Gebrauch den Zugang zum Verständnis der Kernstruktur vermitteln kann, ist durch die Anregungsspektren der Kerne gegeben. Alle bisher diskutierten Modelle, sphärisches Schalenmodell, Nilsson-Modell und kollektives Rotationsmodell, fußten sowohl in ihrer Konstruktion als auch in

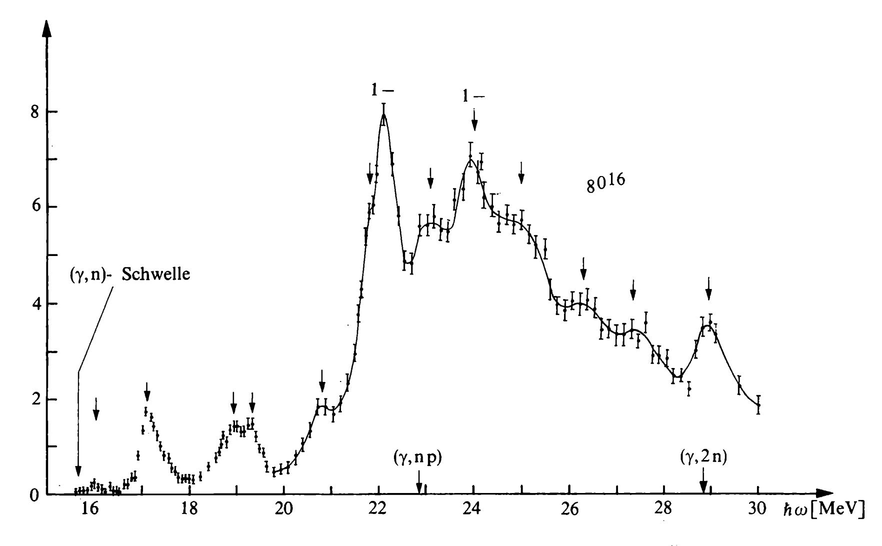


Fig. 30 Wirkungsquerschnitt für (γ, n)-Prozesse als Funktion der γ-Energie [Fu 64].

der Abgrenzung ihrer Gültigkeitsbereiche sehr wesentlich auf einer Analyse der Anregungsspektren. Führt man solche Analysen auf der Basis des Schalenmodells durch, so findet man eine Reihe von Anregungszuständen, die energetisch so tief oder so hoch liegen, daß sie nicht als Schalenmodellanregungen gedeutet werden können.

Beschränkt man sich auf kugelsymmetrische gg-Kerne (insbesondere z.B. O^{16} oder Ca^{40}), so sollte nach dem Oszillatormodell die niedrigste Anregung negativer Parität bei etwa $\hbar\omega$ liegen (experimenteller Abstand zwischen dem ($1p\frac{1}{2}$)- und dem ($1d\frac{5}{2}$)-Niveau in O^{16} ca. 11,5 MeV). In O^{16} findet man jedoch einen (3^-, $T=0$)-Zustand bei 6,14 MeV und außerdem in der Gegend von 22 MeV ungebundene (1^-, $T=1$)-Anregungen, die sich als starke Resonanzen von ca. 5 MeV Breite im γ-Absorptionsquerschnitt oder auch im Wirkungsquerschnitt für (γ, n)-Prozesse etc. (Fig. 30) nachweisen lassen *(Riesenresonanzen)*.

Es wird sich erweisen, daß diese Anregungen nur verstanden werden können, wenn man annimmt, daß an ihnen eine Vielzahl von Nukleonen beteiligt ist. Solche *kollektiven Anregungszustände* erfüllen durchweg zwei Kriterien:

a) Ihre elektromagnetischen Übergangswahrscheinlichkeiten (oder auch ihre Momente) haben eine kollektive Stärke, d.h. sie sind zumindest um ein bis zwei Zehnerpotenzen größer als bei typischen Einteilchenübergängen (bzw. -momenten).

b) Sie treten in den Spektren verschiedener Kerne mit einer gewissen Regelmäßigkeit auf, und ihre Anregungsenergie variiert nur schwach mit der Massenzahl.

Die Spektren sowohl der kugelsymmetrischen als auch der deformierten Kerne enthalten eine Fülle von Zuständen, die diesen Kriterien genügen. Da es nicht Ziel dieses Buches sein kann, in Details einzugehen, wollen wir uns im wesentlichen auf die Herleitung der allgemeinen Methoden beschränken (Abschnitt 3 bis 8), die unter Berücksichtigung der Restwechselwirkung

$$\begin{aligned} V_R = \tfrac{1}{4} \sum_{k_1 \dots k_4} \langle k_1 k_2 | \bar{v} | k_3 k_4 \rangle a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} a_{k_4} a_{k_3} \\ - \sum_{k_1} \sum_{k_2=1}^{A} \langle k_1 k_2 | \bar{v} | k_1 k_2 \rangle a^\dagger_{k_1} a_{k_1} \end{aligned} \qquad \text{(VI.1)}$$

eine Deutung der Riesenresonanzen und der tiefliegenden ($T=0$)-Zustände ermöglichen. Insbesondere werden wir nicht auf die kollektiven Schwingungszustände in stark deformierten Kernen eingehen, die ohne das Superflüssigkeitsmodell nicht verstanden werden können.

Wir stellen deshalb als Beispiel in Abschnitt 2 einige allgemeine Überlegungen zum Phänomen der Riesenresonanz an, die sich später als nützlich erweisen werden. In Abschnitt 9 wollen wir das Auftreten von Geisterzuständen diskutieren. Der letzte Abschnitt enthält einen kurzen Vergleich mit dem Experiment.

2. *Riesenresonanzen*

Regt man die Riesenresonanz durch elektromagnetische Strahlung an, so ist aufgrund der in Kapitel II diskutierten Auswahlregeln (II.62) klar, daß dieses 1^--Niveau aus einem bei gg-Kernen vorliegenden 0^+-Grundzustand nur durch Absorption von Dipolstrahlung angeregt werden kann. Um die Kollektivität der Übergangswahrscheinlichkeit vom Grundzustand in den $(1^-, T=1)$-Zustand beurteilen zu können, kann man beispielsweise versuchen, den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{tot}} = \int_0^\infty \sigma(E)\,\mathrm{d}E \tag{VI.2}$$

für Dipolabsorption zu berechnen. Dies führt zu der schon in der Physik der Elektronenhülle bekannten *Dipolsummenregel.* Wir werden sehen, daß die *Dipolsumme* eine kollektive Größe darstellt, die proportional zur Teilchenzahl ist. Der experimentell bestimmte Bruchteil von σ_{tot}, der allein von der Riesenresonanz ausgeschöpft wird, ist ein Maß für die Kollektivität dieses Anregungszustandes.

Unter der Voraussetzung impulsunabhängiger Zweiteilchenwechselwirkungen wird im Anhang II für (VI.2) folgender Ausdruck hergeleitet:

$$\int_0^\infty \sigma_{\text{Dipol}}(E)\,\mathrm{d}E = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar c} \sum_n (E_n - E_0)\,|\langle \Psi_0 | D | \Psi_n \rangle|^2. \tag{VI.3}$$

Der *Dipoloperator*

$$D = \frac{NZ}{A}\left(\frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{Z} z_i - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} z_i\right) = \frac{NZ}{A}\,z \tag{VI.4}$$

ist proportional zur Differenz r der Schwerpunkte der Protonen bzw. Neutronen. Er stellt also eine echte „kollektive Variable" dar. Die Vorstellung des Tröpfchenmodells von der Riesenresonanz als Zustand, in dem die beiden Schwerpunkte gegeneinander schwingen, steht in engem Zusammenhang damit (Steinwedel, Jensen [SJ 50]).

Durch Feldoperatoren ausgedrückt, hat der Dipoloperator die Form:

$$D = \frac{NZ}{A}\left(\frac{1}{Z}\sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | z | \beta \rangle\, a_\alpha^{\mathrm{p}\dagger} a_\beta^{\mathrm{p}} - \frac{1}{N}\sum_{\gamma\delta} \langle \gamma | z | \delta \rangle\, a_\gamma^{\mathrm{n}\dagger} a_\delta^{\mathrm{n}}\right). \tag{VI.5}$$

Mit Hilfe von Isospinoperatoren schreiben sich für $N=Z$ (VI.4) und (VI.5) in folgender Weise:

$$D = \frac{NZ}{A}\left(\frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{Z} z_i \frac{1+\tau_3^{(i)}}{2} - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} z_i \frac{1-\tau_3^{(i)}}{2}\right) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{A} \tau_3^{(i)} z_i, \qquad \text{(VI.6a)}$$

$$D = \tfrac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} \langle\alpha|\tau_3 z|\beta\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\beta. \qquad \text{(VI.6b)}$$

Für die Dipolsumme (VI.3) kann man einen geschlossenen Ausdruck angeben. Hierzu benutzt man die Identität:

$$2\sum_n |\langle\Psi_0|D|\Psi_n\rangle|^2 (E_n - E_0) = \langle\Psi_0|[D,[H,D]]|\Psi_0\rangle. \qquad \text{(VI.7)}$$

Nimmt man in H (V.20) lokale Zweiteilchenwechselwirkungen an (keine Abhängigkeit vom Impuls und von Austauschmischungen), so berechnet man leicht:

$$\langle\Psi_0|[D,[H,D]]|\Psi_0\rangle = \frac{NZ}{A}\,\frac{\hbar^2}{m}. \qquad \text{(VI.8)}$$

Für die Dipolsumme folgt schließlich:

$$\int_0^\infty \sigma_{\mathrm{Dipol}}(E)\,\mathrm{d}E = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc}\,\frac{NZ}{A} \simeq 0{,}06\,\frac{NZ}{A}\ \mathrm{MeV}\cdot\mathrm{barn}. \qquad \text{(VI.9)}$$

Dieser Wert der Dipolsumme vergrößert sich um ca. 40 bis 80%, wenn man in (VI.8) eine Zweiteilchenzentralkraft mit Austauschcharakter (IV.33) einsetzt (siehe z. B. Brenig [Br 65], S. 79) und gibt dann in etwa die richtige Größe des über alle Energien integrierten Wirkungsquerschnittes wieder. Dabei erweist sich, daß bei O^{16} in den Einteilchenresonanzen unterhalb 20 MeV etwa 3% der Dipolsumme liegen, während von den 1^--Niveaus unterhalb 30 MeV etwa 50% ausgeschöpft werden, was den kollektiven Charakter der Riesenresonanz (Fig. 30) deutlich wiederspiegelt. Der Rest der Dipolsumme liegt oberhalb 30 MeV (Anderson et al. [An 63], Fuller und Hayward [FH 62], S. 186).

3. *Die Tamm-Dancoff-Methode*

Zur Beschreibung der nach dem Schalenmodell nicht erklärbaren *kollektiven* Anregungszustände müssen wir die Restwechselwirkung V_R (VI.1) berücksichtigen. Die exakte Lösung der Schrödingergleichung kann man rein formal ausdrücken als Diagonalisation von V_R im Raum aller möglichen Schalenmodellanregungen, d.h. man müßte den wahren Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ und die wahren Anregungszustände $|\Psi_\nu\rangle$ nach allen möglichen Konfigurationen im Produktraum entwickeln

$$
\begin{aligned}
|\Psi_0\rangle \equiv |0\rangle &= d_0|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{\bar{1}\underline{2}} d_{\bar{1}\underline{2}}\, a_{\bar{1}}^{\dagger} a_{\underline{2}} |\mathrm{HF}\rangle + \\
&\quad + \sum_{\bar{1}\bar{2}\underline{3}\underline{4}} d_{\bar{1}\bar{2}\underline{3}\underline{4}}\, a_{\bar{1}}^{\dagger} a_{\bar{2}}^{\dagger} a_{\underline{3}} a_{\underline{4}} |\mathrm{HF}\rangle + \cdots \\
|\Psi_\nu\rangle \equiv |\nu\rangle &= c_0^{\nu}|\mathrm{HF}\rangle + \sum_{\bar{1}\underline{2}} c_{\bar{1}\underline{2}}^{\nu}\, a_{\bar{1}}^{\dagger} a_{\underline{2}} |\mathrm{HF}\rangle + \\
&\quad + \sum_{\bar{1}\bar{2}\underline{3}\underline{4}} c_{\bar{1}\bar{2}\underline{3}\underline{4}}^{\nu}\, a_{\bar{1}}^{\dagger} a_{\bar{2}}^{\dagger} a_{\underline{3}} a_{\underline{4}} |\mathrm{HF}\rangle + \cdots
\end{aligned}
\tag{VI.10}
$$

und nach allen Koeffizienten d und c^{ν} variieren.

Hierbei ist $|\mathrm{HF}\rangle$ durch (V. 33) gegeben und wird näherungsweise durch die Modellzustände eines phänomenologischen Einteilchenpotentials reproduziert. Über- bzw. unterstrichene Zahlen beziehen sich auf Summationsbereiche oberhalb bzw. unterhalb der Fermikante. Der Operator $a_{\bar{1}}^{\dagger} a_{\underline{2}}$ vernichtet also unterhalb E_{F} ein Teilchen (erzeugt ein Loch) und erzeugt ein Teilchen oberhalb E_{F}. Er wird deshalb als Teilchen-Loch-Erzeugungsoperator bezeichnet (Fig. 31).

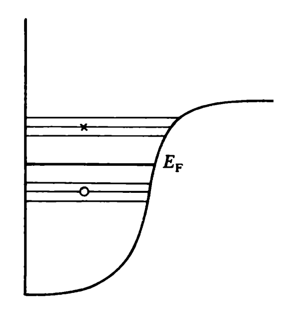


Fig. 31 Teilchen-Loch-Anregung im Schalenmodell.

Die exakte Diagonalisation von V_{R} im Rahmen von (VI. 10) ist eine ebenso unlösbare Aufgabe wie die exakte Lösung der vollen Schrödingergleichung. Nimmt man jedoch an, daß der Grundzustand des Kernes durch ein Schalenmodell in einer vernünftigen Näherung beschrieben werden kann und daß die darauf aufbauenden Anregungszustände gegeben sind durch die Resonanzen eines Systems, bestehend aus dem Kern und einer äußeren Störung $\sum_{\mu\nu} W_{\mu\nu}(t) a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}$, im Grenzfall $W \to 0$, so

wird eine brauchbare Näherungslösung dadurch zu gewinnen sein, daß man aus der Entwicklung (VI.10) nur folgenden Ansatz übrigbehält:

$$|0\rangle \simeq |\mathrm{HF}\rangle, \quad |\nu\rangle \simeq \sum_{\underline{1}\,\underline{2}} c^{\nu}_{\underline{1}\,\underline{2}}\, a^{\dagger}_{\underline{1}}\, a_{\underline{2}} |\mathrm{HF}\rangle. \tag{VI.11}$$

Der Hauptnachteil dieses Ansatzes liegt darin, daß man Korrelationen nur in den Anregungen berücksichtigt, den Grundzustand jedoch unverändert läßt. In den Abschnitten 5, 6 und 7 werden wir eingehend die Konstruktion und die Konsequenzen eines *korrelierten Grundzustandes* besprechen.

Da der Hamiltonoperator H mit dem Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ und dem Gesamtisospin $\boldsymbol{T}$ vertauscht, werden wir in Ausnutzung dieser Symmetrien zweckmäßig in der Entwicklung (VI.11) Teilchen und Loch zu I und T koppeln:

$$|m i I M T\rangle = \sum_{M_L M_S} c(L S I; M_L\, M_S M) |m i L S T\rangle, \tag{VI.12a}$$

$$\begin{aligned} |m i L S T\rangle = \sum_{\text{alle}\, m} & (-1)^{l_i - m^l_i} (-1)^{\frac{1}{2} - m^s_i} (-1)^{\frac{1}{2} - m^t_i} c(l_m\, l_i\, L; m^l_m - m^l_i M_L) \\ & \times c(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} S; m^s_m - m^s_i M_S)\, c(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2} T; m^t_m - m^t_i M_T) \\ & \times a^{\dagger}_{l_m m^l_m m^s_m m^t_m}\, a_{l_i m^l_i m^s_i m^t_i} |\mathrm{HF}\rangle . \end{aligned} \tag{VI.12b}$$

Die in (VI.12b) angegebene Kopplungsvorschrift kann qualitativ folgendermaßen eingesehen werden. In Wirklichkeit wären alle A Teilchen derjenigen Slaterdeterminante zu koppeln, in welcher der Zustand φ_i durch den Zustand φ_m ersetzt ist. Es stellt sich jedoch heraus, daß man stattdessen auch den Zustand $|m\rangle$ und den vernichteten Zustand $|i\rangle$ unter der oben angegebenen Vorschrift koppeln kann. Dies beruht auf einer Eigenschaft von Determinanten (siehe z. B. Brown [Br 64], S. 38 ff.).

Da wir uns hier auf eine qualitative Diskussion der auftretenden Effekte beschränken wollen, sehen wir im folgenden zunächst der Einfachheit halber von der Kopplung ab.

Benutzt man (VI.11) als Variationsansatz, indem man nach den Koeffizienten $c^{\nu}_{\underline{1}\,\underline{2}}$ variiert

$$|\delta \hat{\Psi}_{\nu}\rangle = a^{\dagger}_{\underline{1}}\, a_{\underline{2}} |\mathrm{HF}\rangle\, \delta c^{\nu}_{\underline{1}\,\underline{2}}, \tag{VI.13}$$

so folgt aus der Variationsbedingung (V.7) wie üblich eine Säkulargleichung zur Bestimmung von Eigenwerten und Entwicklungskoeffizienten:

$$\sum_{nj} \{\langle \mathrm{HF}| a^{\dagger}_i a_m H\, a^{\dagger}_n a_j |\mathrm{HF}\rangle - E_{\nu} \langle \mathrm{HF}| a^{\dagger}_i a_m\, a^{\dagger}_n a_j |\mathrm{HF}\rangle\}\, c^{\nu}_{nj} = 0. \tag{VI.14a}$$

Mit (V.32) können wir (VI.14a) in eine bequeme Form bringen:

$$\sum_{nj} \langle \mathrm{HF}|a_i^\dagger a_m [H, a_n^\dagger a_j]|\mathrm{HF}\rangle c_{nj}^\nu = (E_\nu - E_0^{\mathrm{HF}}) c_{mi}^\nu. \qquad \text{(VI.14b)}$$

Der Kommutator $[H, a_n^\dagger a_j]$ läßt sich unter Benutzung von (V.21) und (V.18) leicht ausrechnen:

$$\begin{aligned}[H, a_\rho^\dagger a_\sigma] &= \sum_\alpha \{t_{\alpha\rho} a_\alpha^\dagger a_\sigma - t_{\sigma\alpha} a_\rho^\dagger a_\alpha\} \\ &\quad + \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\delta} \bar{v}_{\alpha\beta,\rho\delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\sigma - \tfrac{1}{2} \sum_{\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\sigma\beta,\gamma\delta} a_\rho^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma .\end{aligned} \qquad \text{(VI.15)}$$

Mit der Definition (V.27) der Hartree-Fock-Einteilchenenergien ε_λ und den Rechenregeln über die Auswertung von Grundzustandserwartungswerten von Feldoperatoren (Anhang I) erhalten wir schließlich die *Tamm-Dancoff-Gleichung:*

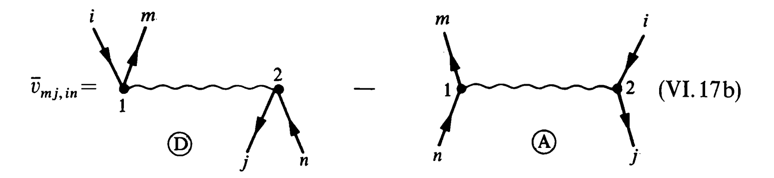
$$\sum_{nj} \{(\varepsilon_m - \varepsilon_i)\delta_{mn}\delta_{ij} + \bar{v}_{mj,in}\} c_{nj}^\nu = E_\nu^{\mathrm{TD}} c_{mi}^\nu. \qquad \text{(VI.16)}$$

(E_0^{HF} wurde durch Verschieben der Energieskala gleich Null gesetzt, E_ν^{TD} ist die Anregungsenergie des Zustands $|\nu\rangle$ in Tamm-Dancoff-Näherung).

Für viele Zwecke hat es sich als nützlich erwiesen, die Matrixelemente der Wechselwirkung $\bar{v}$

$$\begin{aligned}\bar{v}_{mj,in} &= \int \varphi_m^*(\xi_1)\varphi_j^*(\xi_2) v(\xi_1, \xi_2) \varphi_i(\xi_1) \varphi_n(\xi_2)\, d^3\xi_1\, d^3\xi_2 \\ &\quad - \int \varphi_m^*(\xi_1)\varphi_j^*(\xi_2) v(\xi_1, \xi_2) \varphi_n(\xi_1) \varphi_i(\xi_2)\, d^3\xi_1\, d^3\xi_2 .\end{aligned} \qquad \text{(VI.17a)}$$

graphisch zu veranschaulichen. Man stellt hierzu v durch eine Schlangenlinie dar und die Zustandsfunktionen durch Linien mit Pfeilen (Pfeil nach oben: Teilchen, Pfeil nach unten: Loch), die man entsprechend ihrer Koordinaten am Wechselwirkungspunkt 1 bzw. 2 der Schlangenlinie einfügt. Vereinbart man noch, daß rechts der Wechselwirkung stehende Linien auf die Wechselwirkung zulaufen, links stehende weglaufen sollen, so ist $\bar{v}_{mj,in}$ durch folgende *Graphen* gegeben:



(VI.17b)

Denkt man sich eine Zeitachse senkrecht zur Wellenlinie, so wird im *direkten Term* D das Teilchen-Loch-Paar $|nj\rangle$ unter Emission eines neuen Paares $|mi\rangle$ vernichtet, während im *Austauschterm* A das Paar $|nj\rangle$ in die neuen Zustände $|mi\rangle$ gestreut wird.

4. Das schematische Modell

Die Lösung der Tamm-Dancoff-Gleichung stellt im allgemeinen ein recht umfangreiches numerisches Problem dar (dies wird oft auch als Konfigurationsmischungsrechnung im Schalenmodell oder kurz Schalenmodellrechnung bezeichnet). Man gelangt jedoch unter stark vereinfachenden Annahmen über die Zweiteilchenwechselwirkung zu einer qualitativen Lösung, die als *schematisches Modell* bezeichnet wird.

Eigenzustände zum Gesamtisospin. Die qualitativen Unterschiede zwischen kollektiven Zuständen mit Gesamtisospin 1 bzw. 0 kann man am besten studieren, wenn man in (VI.12b) die Kopplung zwischen Teilchen und Loch wenigstens bezüglich des Isospins berücksichtigt (Brown et al. [BC 61]). Bevor wir uns jedoch diesem Problem zuwenden, wollen wir zeigen, daß Zustände, die durch Dipolabsorption aus Kernen mit $T=0$ hervorgehen (Dipolriesenresonanzen), den Gesamtisospin $T=1$ besitzen. Unter Verwendung von (VI.6a) können wir $\boldsymbol{T}^2 D|T=0\rangle$ berechnen, indem wir zunächst die Beziehung $\boldsymbol{T}^2|T=0\rangle=0$ ausnutzen:

$$\boldsymbol{T}^2 \sum_{i=1}^{A} t_z^{(i)} z_i |T=0\rangle = \sum_{i=1}^{A} [\boldsymbol{T}^2, t_z^{(i)}] z_i |T=0\rangle. \qquad \text{(VI.18)}$$

Die Identitäten

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{T}^2, t_z^{(i)}] &= [T_+ T_-, t_z^{(i)}], \\ [T_-, t_z^{(i)}] &= t_-^{(i)}, \\ [T_+, t_-^{(i)}] &= 2 t_z^{(i)}, \\ T_+|T=0\rangle &= T_-|T=0\rangle = 0 \end{aligned} \qquad \text{(VI.19)}$$

setzt man in (VI.18) ein und erhält:

$$\boldsymbol{T}^2 \sum_{i=1}^{A} t_z^{(i)} z_i |T=0\rangle \equiv \boldsymbol{T}^2 |T\rangle = T(T+1)|T\rangle = 2|T=1\rangle. \qquad \text{(VI.20)}$$

Durch Anwendung isospinunabhängiger Operatoren auf $|T=0\rangle$ können wieder nur Zustände mit $T=0$ entstehen.

Nach dieser Betrachtung wollen wir die Kopplung zum Gesamtspin S und zum Gesamtisospin T in (VI.12b) explizit durchführen, indem wir die auftretenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten berechnen:

$$|mi\,S=0\;T=1\rangle = \tfrac{1}{2}\{a_m^\dagger a_i(\mathrm{p}\uparrow) + a_m^\dagger a_i(\mathrm{p}\downarrow) - a_m^\dagger a_i(\mathrm{n}\uparrow) - a_m^\dagger a_i(\mathrm{n}\downarrow)\}|\mathrm{HF}\rangle, \tag{VI.21a}$$

$$|mi\,S=0\;T=0\rangle = \tfrac{1}{2}\{a_m^\dagger a_i(\mathrm{p}\uparrow) + a_m^\dagger a_i(\mathrm{p}\downarrow) + a_m^\dagger a_i(\mathrm{n}\uparrow) + a_m^\dagger a_i(\mathrm{n}\downarrow)\}|\mathrm{HF}\rangle. \tag{VI.21b}$$

Dabei wurden die Abkürzungen

$$a_m^\dagger a_i(\mathrm{p}\uparrow) \equiv a^\dagger_{l_m m^l_m \frac{1}{2}\frac{1}{2}} a_{l_i m^l_i \frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad \text{usf.} \tag{VI.21c}$$

benutzt, d. h. der Teilchen-Loch-Operator (VI.21c) entspricht der Anregung eines Protons mit Spin nach oben.

In einer weiteren Kurzschreibweise können wir dann (VI.21a,b) folgendermaßen angeben:

$$\begin{aligned} |mi\,S=0\;T=1\rangle &= \tfrac{1}{2}(\mathrm{P}\uparrow + \mathrm{P}\downarrow - \mathrm{N}\uparrow - \mathrm{N}\downarrow)_{mi}, \\ |mi\,S=0\;T=0\rangle &= \tfrac{1}{2}(\mathrm{P}\uparrow + \mathrm{P}\downarrow + \mathrm{N}\uparrow + \mathrm{N}\downarrow)_{mi}. \end{aligned} \tag{VI.22}$$

Damit lassen sich analog zum Fall ohne Kopplung die in (VI.14a) auftretenden Matrixelemente der Restwechselwirkung V_R zwischen den Zuständen (VI.22) durch die Graphen (VI.17b) ausdrücken, wobei V_R der Einfachheit halber nur Zweiteilchenkräfte enthalten soll, welche die Spin- und Isospinquantenzahlen nicht beeinflussen (Wignerkräfte). Dadurch werden solche Graphen gleich Null, bei denen nicht an den Wechselwirkungspunkten je zwei Linien mit gleichen Spin- und Isospinindizes hängen, und man erhält:

$$\begin{aligned} \langle mi\;\; S=0\;T=0|V_\mathrm{R}|nj\;\; S=0\;T=0\rangle &= 4v_{mj,in} - v_{mj,ni}, \\ \langle mi\;\; S=0\;T=1|V_\mathrm{R}|nj\;\; S=0\;T=1\rangle &= -v_{mj,ni}. \end{aligned} \tag{VI.23}$$

Verwendet man als Zweiteilchenwechselwirkung ein Kontaktpotential, so sind die beiden in (VI.23) auftretenden Matrixelemente $v_{mj,in}$ und $v_{mj,ni}$ gleich, und man sieht, daß die Restwechselwirkung anziehend für $(T=0)$-Zustände und abstoßend für $(T=1)$-Zustände ist. Damit erhält man bereits eine qualitative Erklärung der beobachteten Effekte: Gegenüber dem Schalenmodell werden die $(T=1)$-Zustände angehoben, die $(T=0)$-Zustände abgesenkt.

Wahl der Zweiteilchenwechselwirkung. Außer den bisherigen, die Spin- und Isospinabhängigkeit von V_R betreffenden Einschränkungen

sind weitere einschneidende Forderungen an V_R zu stellen, um eine analytische Lösung der Tamm-Dancoff-Gleichung in einem schematischen Modell zu gewinnen (siehe z.B. Brown et al. [BB 60], [BE 61]):

a) Die Wechselwirkung sei kurzreichweitig, d. h.

$$v_{mj,in} \simeq v_{mj,ni}, \tag{VI.24}$$

b) die Wechselwirkung sei separabel in den Teilchen-Loch-Koordinaten:

$$\langle m i I S=0\, T | V_R | n j I S=0\, T \rangle = \lambda^{(I)} D_{mi}^{(I)} D_{nj}^{(I)*}, \tag{VI.25a}$$

wobei – wie erwähnt – aus (VI.23) und dem anziehenden Charakter von V_R folgt:

$$\begin{aligned} \lambda^{(I)} &> 0, \text{ für } T=1, \\ \lambda^{(I)} &< 0, \text{ für } T=0. \end{aligned} \tag{VI.25b}$$

Im Falle der Dipolriesenresonanz ($I=1$ für gg-Kerne) setzt man für die Größen $D_{mi}^{(1)}$ einfachheitshalber die Matrixelemente des in (VI.6a) angegebenen Dipoloperators (für $N=Z$) ein:

$$D_{im}^{(1)} = \langle \mathrm{HF} | D | m i I=1\, S=0\, T=1 \rangle. \tag{VI.26}$$

Um zu sehen, welchen Annahmen über die Wechselwirkung das entspräche, entwickelt man das Zweiteilchenpotential nach Kugelflächenfunktionen:

$$v(|r_1 - r_2|, \tau_1, \tau_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=-k}^{k} v_k^{(\tau_1,\tau_2)}(r_1, r_2)\, Y_k^m(\Omega_1)\, Y_k^{-m}(\Omega_2). \tag{VI.27}$$

Sind, wie in (VI.25a), die Teilchen-Loch-Paare zum Gesamtdrehimpuls I gekoppelt, so trägt wegen der Drehimpulsauswahlregeln und der Struktur von (VI.17) im direkten Graphen nur der Term $k=I$ aus der Entwicklung (VI.27) bei. Wäre außerdem der Koeffizient v_k von der Form

$$v_k^{(\tau_1,\tau_2)}(r_1, r_2) \sim r_1^k r_2^k \tau_3^{(1)} \tau_3^{(2)}, \tag{VI.28}$$

so würde der direkte Graph genau in der Form (VI.25a) und (VI.26) separieren. Diese Argumentation versagt zwar für den Austauschgraphen, der wegen (VI.23) für ($T=1$)-Zustände sogar der maßgebliche ist. Trotzdem reproduziert der Ansatz (VI.25a) auch für ($T=1$)-Zustände die Ergebnisse recht gut, die man aus numerischen Rechnungen mit realistischen Kräften im Tamm-Dancoff-Modell erhält.

Lösung der Tamm-Dancoff-Gleichung. Mit dem Ansatz (VI.25a) vereinfacht sich die unter Berücksichtigung der Kopplung erhaltene, zu

(VI.16) analoge Säkulargleichung in folgender Weise:

$$(E_\nu^{\mathrm{TD}} - \varepsilon_m + \varepsilon_i)\, c_{mi}^\nu = \lambda^{(I)} D_{mi}^{(I)} \sum_{nj} D_{nj}^{(I)*} c_{nj}^\nu . \qquad \text{(VI.29)}$$

Benutzt man die Vollständigkeitsrelation im Unterraum der Einteilchen-Einloch-Konfigurationen und die Konstanz der Summe in (VI.29)

$$\sum_{nj} D_{nj}^{(I)*} c_{nj}^\nu = \text{ const}, \quad \sum_{mi} c_{mi}^{\nu*} c_{mi}^{\nu'} = \delta_{\nu\nu'}, \qquad \text{(VI.30)}$$

so kann man (VI.29) nach den Koeffizienten c_{mi}^ν auflösen:

$$c_{mi}^\nu = \frac{N D_{mi}^{(I)}}{E_\nu^{\mathrm{TD}} - \varepsilon_m + \varepsilon_i}, \quad N^{-2} = \sum_{mi} \frac{|D_{mi}^{(I)}|^2}{(E_\nu^{\mathrm{TD}} - \varepsilon_m + \varepsilon_i)^2} . \qquad \text{(VI.31a)}$$

Aus (VI.29) folgt nach Multiplikation mit $D_{mi}^{(I)}(E_\nu^{\mathrm{TD}} - \varepsilon_m + \varepsilon_i)^{-1}$ und Summation über m, i die Eigenwertgleichung für die Anregungsenergien:

$$\frac{1}{\lambda^{(I)}} = \sum_{mi} \frac{|D_{mi}^{(I)}|^2}{E_\nu^{\mathrm{TD}} - \varepsilon_m + \varepsilon_i} . \qquad \text{(VI.31b)}$$

(VI.31b) kann man graphisch lösen, indem man die Schalenmodellanregungsenergien $\varepsilon_{mi} = \varepsilon_m - \varepsilon_i$ auf der Abszisse aufträgt. Dann erhält man jeweils zwischen zwei Schalenmodellanregungen einen Eigenwert E_ν^{TD} als Schnittpunkt der rechten Seite von (VI.31b) mit der Geraden $1/\lambda^{(I)} \lessgtr 0$. Ein Eigenwert liegt jedoch weit oberhalb $\lambda^{(I)} > 0$ bzw. unterhalb $\lambda^{(I)} < 0$ dieser Anregungen (Fig. 32). (Hierbei geht die Annahme eines beschränkten Konfigurationsraums in die Diskussion ein.)

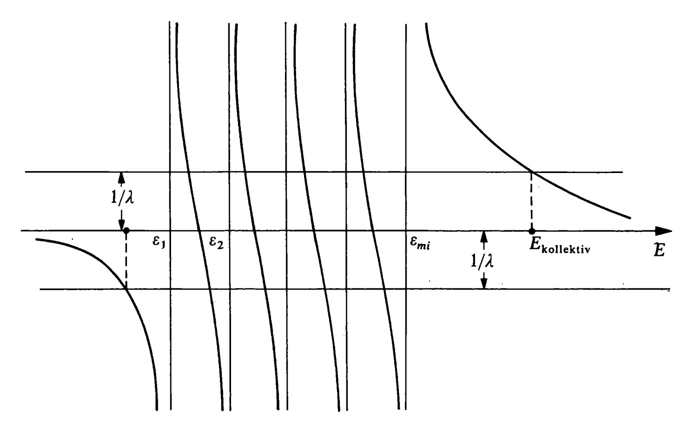


Fig. 32 Graphische Lösung der Dispersionsgleichung (VI.31b).

Diese eine Anregung wird, wie sich am entarteten Fall leicht zeigen läßt, durch eine *kohärente* (kohärent heißt in diesem Fall, daß alle Korrekturen zur ungestörten Energie mit gleichem Vorzeichen eingehen) Überlagerung aller Matrixelemente der Restwechselwirkung stark nach oben ($T=1$) bzw. nach unten ($T=0$) verschoben. Sie entspricht also unseren kollektiven Zuständen $|1^-, T=1\rangle$ bzw. $|3^-, T=0\rangle$.

Entarteter Fall. Setzt man alle ε_{mi} gleich ε, so folgt aus (VI.31a, b)

$$c_{mi} = \frac{D_{mi}^{(I)}}{\left[\sum_{mi} |D_{mi}^{(I)}|^2\right]^{1/2}}, \quad E_{\text{kollektiv}} = \varepsilon + \sum_{mi} \lambda^{(I)} |D_{mi}^{(I)}|^2. \tag{VI.32}$$

Dies bedeutet also, daß der kollektive Zustand um die Summe aller Diagonalelemente der Wechselwirkung verschoben wird.

5. *Diskussion der Tamm-Dancoff-Methode*

Verletzung der Dipolsummenregel. Im Tamm-Dancoff-Modell bleibt die allgemeine Beziehung für den totalen Wirkungsquerschnitt für Dipolabsorption (Dipolsummenregel) nicht erhalten. Diese Behauptung kann man z. B. im schematischen Modell leicht nachprüfen, indem man die mittlere Anregungsenergie im Schalenmodell und im Tamm-Dancoff-Modell nach Absorption von Dipolstrahlung berechnet:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{mi} \varepsilon_{mi} |\langle \text{HF}|D|mi\rangle|^2}{\sum_{mi} |\langle \text{HF}|D|mi\rangle|^2}, \tag{VI.33}$$

$$|mi\rangle \equiv |mi\, I=1\; S=0\; T=1\rangle,$$

$$\bar{E} = \frac{\sum_{\nu} E_\nu |\langle \text{HF}|D|\nu\rangle|^2}{\sum_{\nu} |\langle \text{HF}|D|\nu\rangle|^2}. \tag{VI.34}$$

In den Zählern von (VI.33) bzw. (VI.34) steht jeweils bis auf gleiche Faktoren die Dipolsumme (vgl. (VI.3)). Die Nenner gehen durch eine unitäre Transformation der Zwischenzustände auseinander hervor und sind deshalb gleich:

$$\sum_{mi} \langle \text{HF}|D|mi\rangle \langle mi|D|\text{HF}\rangle = \sum_{\nu} \langle \text{HF}|D|\nu\rangle \langle \nu|D|\text{HF}\rangle = \langle \text{HF}|D^2|\text{HF}\rangle. \tag{VI.35a}$$

Im schematischen Modell gilt weiter:

$$\bar{E} - \bar{\varepsilon} = \lambda \sum_{mi} |D_{mi}|^2. \qquad \text{(VI.35b)}$$

Daraus folgt schließlich:

$$\frac{\sum\limits_{mi} \varepsilon_{mi} |\langle \mathrm{HF}|D|mi\rangle|^2}{\sum\limits_{\nu} E_\nu |\langle \mathrm{HF}|D|\nu\rangle|^2} = \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{E}} \neq 1. \qquad \text{(VI.36)}$$

Im Schalenmodell ist die Dipolsummenregel automatisch erfüllt, da bei ihrer Ableitung nur eingeht, daß der in der jeweiligen Näherung verwendete Hamiltonoperator ein vollständiges Anregungsspektrum des A-Nukleonensystems besitzt. Seien H_S ein Schalenmodellhamiltonoperator mit lokalem Einteilchenpotential, $|\Phi_n^S\rangle$ das vollständige System seiner Eigenvektoren und E_n^S die dazugehörigen Eigenwerte, so lautet die Dipolsummenregel im Schalenmodell:

$$\sum_n |\langle \Phi_0^S|D|\Phi_n^S\rangle|^2 (E_0^S - E_n^S) = \sum_{mi} \varepsilon_{mi} \langle \Phi_0^S|D|\Phi_{mi}^S\rangle \langle \Phi_{mi}^S|D|\Phi_0^S\rangle$$

$$= \tfrac{1}{2} \langle \Phi_0^S|[D,[H_S,D]]|\Phi_0^S\rangle = \frac{NZ}{A}\frac{\hbar^2}{2m}. \qquad \text{(VI.37)}$$

Im Tamm-Dancoff-Modell wird die Dipolsumme somit verletzt.

Verschiebung der Dipolstärke. Die Kollektivität des verschobenen ($T=1$)-Zustandes kann man z. B. am entarteten Fall nachprüfen, indem man die Aufteilung der gesamten Absorptionswahrscheinlichkeit auf die Anregungszustände untersucht. Es gilt nämlich für den verschobenen Zustand:

$$|\nu_D\rangle = \frac{1}{\left[\sum\limits_{mi} |D_{mi}|^2\right]^{1/2}} \sum_{mi} D_{mi} |mi\rangle. \qquad \text{(VI.38)}$$

Damit schreibt sich die gesamte Dipolstärke in der Form:

$$\sum_\nu |\langle \nu|D|\mathrm{HF}\rangle|^2 = \sum_{\nu \neq \nu_D} |\langle \nu|D|\mathrm{HF}\rangle|^2 + \left| \frac{1}{\left[\sum\limits_{mi} |D_{mi}|^2\right]^{1/2}} \sum_{mi} \langle mi|D|\mathrm{HF}\rangle D_{mi}^* \right|^2$$

$$= \sum_{\nu \neq \nu_D} \cdots + \frac{1}{\sum\limits_{mi} |D_{mi}|^2} \left| \sum_{mi} |D_{mi}|^2 \right|^2$$

$$= \sum_{\nu \neq \nu_D} \cdots + \sum_{mi} |D_{mi}|^2. \qquad \text{(VI.39)}$$

Wegen (VI.35) wird also die gesamte Dipolstärke von dem kollektiven, nach oben verschobenen Zustand ausgeschöpft und somit die in Fig. 30 gezeigte starke 1^--Resonanz qualitativ erklärt.

Diskussion realistischer Rechnungen im Rahmen der Tamm-Dancoff-Methode. Um mit der Tamm-Dancoff-Methode zu möglichst guten Ergebnissen zu gelangen, muß man die bisherigen Betrachtungen hauptsächlich bezüglich der Wahl der Zweiteilchenpotentiale verbessern und außerdem die Kopplung zwischen Teilchen und Loch im Sinne von (VI.12a,b) vollständig berücksichtigen. Elliot und Flowers [EF 57]

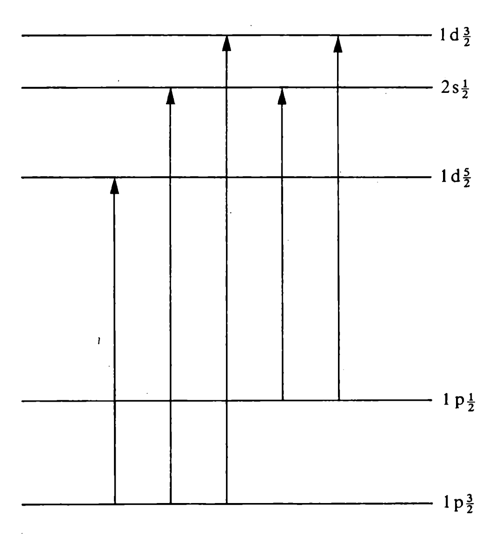


Fig. 33 Mögliche Dipolübergänge zwischen der (1 p)- und (2s-1 d)-Schale in O^{16}.

lösten die Tamm-Dancoff-Gleichung für O^{16}, indem sie als zu diagonalisierenden Unterraum nur die Teilchen-Loch-Anregungen zur nächsthöheren (1d-2s)-Schale zuließen, in der Annahme, daß der Beitrag von höheren Schalen klein sei. Dies liefert für den Dipolzustand eine zu diagonalisierende (5×5)-Matrix, entsprechend den in Fig. 33 eingezeichneten Anregungen. (Der 6. Übergang tritt nicht auf, da $|1d^5/_2\rangle$ und $|1p^1/_2\rangle$ nicht zu $|I=1\rangle$ gekoppelt werden können). Für den 3^--Zustand ergibt sich – wie man leicht überlegt – eine (3×3)-Matrix.

Es wurden so ein $(3^-, T=0)$-Zustand bei $\simeq 7$ MeV und zwei $(1^-, T=1)$-Zustände bei 22,6 bzw. 25,2 MeV gefunden, wobei die beiden Dipolzustände zusammen 97% und der Oktupolzustand 68% der gesamten Dipol- bzw. Oktupolübergangswahrscheinlichkeiten der im obigen Ansatz berücksichtigten Schalenmodellanregungen ausschöpfen; die restlichen Übergangswahrscheinlichkeiten sind auf die übrigen 3 bzw. 2 Zustände verteilt. Im Falle des $(3^-, T=0)$-Zustands ist jedoch die so ermittelte Übergangswahrscheinlichkeit – verglichen mit den Experimenten – immer noch um einen Faktor 3 bis 6 zu klein. Dies ist einer der Gründe, die eine Verfeinerung des einfachen Ansatzes (VI.11) erforderlich machen, mit der wir uns in den nächsten Abschnitten beschäftigen werden.

6. *Grundzustandskorrelationen im Teilchen-Loch-Bild*

Vorbemerkungen. Eine Näherung unserer bisherigen Betrachtungen bestand in dem Ansatz (VI.11) eines Produktzustandes für den Grundzustand. Diese völlige Vernachlässigung der Restwechselwirkung V_R im Grundzustand wird sicher die Ergebnisse verfälschen, wenn man bedenkt, daß V_R z.B. den tiefliegenden Oktupolzustand um über die Hälfte des ungestörten Energiewertes absenkt.

Zur Behebung dieses Mangels der Tamm-Dancoff-Methode könnte man zunächst daran denken, in der Entwicklung (VI.10) bis zu Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen zu gehen und nach allen Koeffizienten zu variieren. Dies würde jedoch den zu diagonalisierenden Unterraum derart erweitern, daß an die Lösung praktischer Probleme kaum zu denken ist.

Ein Ausweg ist dadurch gegeben, daß man einen Grundzustand annimmt, in dem infolge der Restwechselwirkung virtuelle Zweiteilchen-Zweiloch-Paare angeregt sind, d. h. in dem die Fermikante nicht mehr scharf wie bei einem Produktzustand sondern aufgeweicht ist.

Ein γ-Quant kann somit auf zwei Arten absorbiert werden:

a) entweder wie bisher durch Anregung eines Teilchen-Loch-Paares oder

b) durch Vernichtung eines bereits im Grundzustand virtuell angeregten Teilchen-Loch-Paares.

Die zusätzliche Berücksichtigung der Prozesse b) führt über die Tamm-Dancoff-Methode hinaus zur *Random-Phase-Approximation* (*RPA*).

Herleitung der RPA-Gleichungen. Wir berücksichtigen die Grundzustandskorrelationen, indem wir analog zur Darstellung der Riesen-

resonanzanregung als $D|\mathrm{HF}\rangle$ (vgl. z.B. (VI.38)) einen Operator $Q_\nu^\dagger$ definieren, der jedoch neben der Linearkombination aus Teilchen-Loch-Erzeugungsoperatoren auch einen Term enthält, der Teilchen-Loch-Paare vernichtet:

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{mi} x_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i - \sum_{mi} y_{mi}^\nu a_i^\dagger a_m . \qquad \text{(VI.40)}$$

Die Anregungszustände $|\nu\rangle$ lauten dann:

$$|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger |0\rangle . \qquad \text{(VI.41a)}$$

Hierbei ist $|0\rangle$ ein Grundzustand, der Korrelationen enthält und den wir durch die Beziehung

$$Q_\nu |0\rangle = 0 \qquad \text{(VI.41b)}$$

definieren können, was bedeutet, daß $|0\rangle$ keine durch $Q_\nu^\dagger$ erzeugten Anregungen enthält, beziehungsweise $|\nu\rangle$ orthogonal auf $|0\rangle$ steht.

Variieren wir analog zu (VI.13) nach den Koeffizienten x_{mi}^ν bzw. y_{mi}^ν, so erhalten wir anstelle von (VI.14b) zwei Säkulargleichungen:

$$\langle 0|[a_i^\dagger a_m, H]|\nu\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|a_i^\dagger a_m|\nu\rangle , \qquad \text{(VI.42a)}$$

$$\langle 0|[a_m^\dagger a_i, H]|\nu\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|a_m^\dagger a_i|\nu\rangle . \qquad \text{(VI.42b)}$$

Mit (VI.41b) können wir weiterschreiben:

$$\langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], Q_\nu^\dagger]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|[a_i^\dagger a_m, Q_\nu^\dagger]|0\rangle , \qquad \text{(VI.43a)}$$

$$\langle 0|[[a_m^\dagger a_i, H], Q_\nu^\dagger]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|[a_m^\dagger a_i, Q_\nu^\dagger]|0\rangle . \qquad \text{(VI.43b)}$$

Die Gleichungen (VI.43a, b) vereinfachen sich beträchtlich, wenn man die sog. *Quasibosonennäherung* benutzt. Nimmt man nämlich an, daß sich der exakte Grundzustand nur wenig von einem Hartree-Fock-Grundzustand unterscheidet, so kann man Grundzustandserwartungswerte in Hartree-Fock-Näherung berechnen:

$$\begin{aligned}\langle 0|[a_i^\dagger a_m, a_n^\dagger a_j]|0\rangle &= \delta_{ij}\delta_{mn} - \delta_{mn}\langle 0|a_j a_i^\dagger|0\rangle + \delta_{ij}\langle 0|a_n^\dagger a_m|0\rangle \\ &\simeq \langle \mathrm{HF}|[a_i^\dagger a_m, a_n^\dagger a_j]|\mathrm{HF}\rangle = \delta_{ij}\delta_{mn} . \qquad \text{(VI.44)}\end{aligned}$$

Die Bezeichnung Quasibosonennäherung rührt daher, daß (VI.44) exakt wäre, wenn die Teilchen-Loch-Erzeugungs- bzw. -Vernichtungsoperatoren die Minusvertauschungsregeln für Bosonenfeldoperatoren erfüllten. In Wirklichkeit verletzt (VI.44) das Pauliprinzip. Diese Näherung beruht auf einer physikalischen Argumentation, und ihre Gültigkeit muß an den Ergebnissen getestet werden.

Mit (VI.44) schreibt sich (VI.43a, b):

$$\sum_{nj}\{\langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], a_n^\dagger a_j]|0\rangle x_{nj}^\nu + \langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], a_j^\dagger a_n]|0\rangle y_{nj}^\nu\}$$
$$= (E_\nu - E_0) x_{mi}^\nu, \qquad \text{(VI.45a)}$$

$$\sum_{nj}\{\langle 0|[[a_m^\dagger a_i, H], a_n^\dagger a_j]|0\rangle x_{nj}^\nu + \langle 0|[[a_m^\dagger a_i, H], a_j^\dagger a_n]|0\rangle y_{nj}^\nu\}$$
$$= -(E_\nu - E_0) y_{mi}^\nu. \qquad \text{(VI.45b)}$$

In Quasibosonennäherung haben die Amplituden x_{mi}^ν bzw. y_{mi}^ν eine sehr anschauliche Bedeutung: ihre Quadrate geben die Wahrscheinlichkeit an, mit der die Zustände $a_m^\dagger a_i|0\rangle$ bzw. $a_i^\dagger a_m|0\rangle$ im Anregungszustand $|\nu\rangle$ vorkommen:

$$\begin{aligned}\langle\nu|a_m^\dagger a_i|0\rangle &= \langle 0|[Q_\nu, a_m^\dagger a_i]|0\rangle \simeq x_{mi}^\nu,\\ \langle\nu|a_i^\dagger a_m|0\rangle &= \langle 0|[Q_\nu, a_i^\dagger a_m]|0\rangle \simeq y_{mi}^\nu.\end{aligned} \qquad \text{(VI.45c)}$$

Setzen wir $E_0 = 0$ und benutzen die Identität

$$\langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], a_n^\dagger a_j]|0\rangle^* = \langle 0|[[a_m^\dagger a_i, H], a_j^\dagger a_n]|0\rangle, \qquad \text{(VI.46)}$$

so läßt sich (VI.45a, b) in folgender kompakten Matrixgleichung schreiben:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = E_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} \qquad \text{(VI.47)}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} A_{mi,nj} &= \langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], a_n^\dagger a_j]|0\rangle,\\ B_{mi,nj} &= \langle 0|[[a_i^\dagger a_m, H], a_j^\dagger a_n]|0\rangle,\\ (X^\nu)_{mi} &= x_{mi}^\nu, \quad (Y^\nu)_{mi} = y_{mi}^\nu. \end{aligned} \qquad \text{(VI.48)}$$

Gleichung (VI.47) heißt *RPA-Gleichung*. Sie vereinfacht sich zur Tamm-Dancoff-Gleichung, wenn man alle y_{mi}^ν gleich Null setzt. Ihre Lösung stellt ein nichthermitesches Eigenwertproblem dar im Gegensatz zu (VI.43a, b). Die Hermitezität ist offenbar bei der Quasibosonennäherung verlorengegangen. Eine Folge davon ist, daß die sich aus der RPA-Gleichung ergebenden Anregungsenergien nicht notwendig reell sind. Eine komplexe Lösung ist instabil, d.h. in diesem Fall führt die Quasibosonennäherung zu unphysikalischen Ergebnissen[1].

[1] Im nächsten Abschnitt werden wir die RPA-Lösungen als Schwingungen um den Hartree-Fock-Grundzustand interpretieren, wobei sich die Quasibosonennäherung als äquivalent zu der Annahme kleiner Schwingungen herausstellen wird. Eine Instabilität der Lösungen hat hier dieselbe Bedeutung wie in einem analogen System der klassischen Mechanik (Thouless [Th 1 60]; siehe auch [Th 64], S. 39ff.).

Die Matrixelemente (VI.48) kann man im Rahmen der Quasibosonennäherung durch die Hartree-Fock-Energien (V.27) und die Matrixelemente der Zweiteilchenwechselwirkung ausdrücken:

$$\begin{aligned} A_{mi,nj} &\simeq (\varepsilon_m - \varepsilon_i)\delta_{mn}\delta_{ij} + \bar{v}_{mj,in}, \\ B_{mi,nj} &\simeq \bar{v}_{mn,ij}. \end{aligned} \qquad \text{(VI.49)}$$

In der RPA treten demnach zusätzlich zu den Graphen (VI.17b) auch Graphen der Art



auf, die virtuellen Zweiteilchen-Zweiloch-Anregungen entsprechen. Die x_{mi}^{ν} und y_{mi}^{ν} können so gewählt werden, daß die Zustände $|\nu\rangle$ normiert sind:

$$\langle\nu|\nu\rangle = 1 = \langle 0|[Q_\nu, Q_\nu^\dagger]|0\rangle \simeq \sum_{mi} |x_{mi}^{\nu}|^2 - \sum_{mi} |y_{mi}^{\nu}|^2. \qquad \text{(VI.50)}$$

Dies ist gleichbedeutend mit:

$$(X^{\nu *} - Y^{\nu *}) \begin{pmatrix} X^{\nu} \\ Y^{\nu} \end{pmatrix} = 1. \qquad \text{(VI.51)}$$

Die Lösung der RPA-Gleichung erlaubt auch die Berechnung des gegenüber $|\text{HF}\rangle$ verbesserten Grundzustandes[1]:

$$|0\rangle \sim \left(1 + \sum_{minj} d_{minj} a_m^\dagger a_i a_n^\dagger a_j\right)|\text{HF}\rangle. \qquad \text{(VI.52)}$$

Setzt man nämlich diese Beziehung in Gleichung (VI.41b) ein und benutzt die aus (VI.52) folgenden Symmetrierelationen

$$d_{minj} = -d_{mjni} = -d_{nimj} = -d_{njmi}, \qquad \text{(VI.53)}$$

so ergibt sich unter Vernachlässigung von Mehrteilchen-Mehrloch-Anregungen die Beziehung

$$\sum_{mi}\left[-y_{mi}^{\nu *} + 4\sum_{nj} d_{minj} x_{nj}^{\nu *}\right] a_m^\dagger a_i |\text{HF}\rangle = 0 \qquad \text{(VI.54)}$$

oder

$$y_{mi}^{\nu *} = 4\sum_{nj} d_{minj} x_{nj}^{\nu *}, \quad \text{für alle} \quad \nu; \qquad \text{(VI.55)}$$

(vgl. z.B. Goswami und Pal [GP 63]).

[1] Es sei darauf hingewiesen, daß die RPA-Gleichung (VI.47) zunächst die Berechnung von Energiedifferenzen gestattet. Für die Berechnung der Grundzustandsenergie ist die RPA im allgemeinen nicht gut geeignet.

7. Zeitabhängiges Hartree-Fock-Verfahren

Vorbemerkungen. Um die physikalische Bedeutung der Random-Phase-Approximation noch klarer zu machen, wollen wir die Herleitung der RPA-Gleichungen von einem anderen Standpunkt aus versuchen. Wir werden dabei, ausgehend von den Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren $a_\nu, a_\nu^\dagger$, eine Bewegungsgleichung für die sog. Einteilchendichtematrix $\rho_{\mu\nu}$ (vgl. Anhang III) gewinnen. Hieraus erhalten wir einerseits eine sehr kompakte Form der Hartree-Fock-Gleichung und zum anderen die Deutung der Eigenschwingungen des Systems im Rahmen der RPA als „kleine" Schwingungen des Hartree-Fock-Grundzustandes um seine Gleichgewichtslage. Diese Methode wird als zeitabhängiges Hartree-Fock-Verfahren bezeichnet (siehe z. B. Gottfried und Goldstone [GG 59]).

Ableitung der RPA-Gleichung. Wir gehen aus von den Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren in dem durch den vollen Hamiltonoperator H (V.21) charakterisierten A-Nukleonensystem:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_p = [a_p, H] = \sum_m t_{pm} a_m + \tfrac{1}{2}\sum_{lmn} \bar{v}_{pl,mn} a_l^\dagger a_n a_m, \tag{VI.56}$$

$$-\mathrm{i}\hbar\dot{a}_q^\dagger = [H, a_q^\dagger] = \sum_m a_m^\dagger t_{mq} + \tfrac{1}{2}\sum_{lmn} a_m^\dagger a_n^\dagger a_l \bar{v}_{mn,ql}. \tag{VI.57}$$

Mit der Einteilchendichtematrix

$$\rho_{pq} \equiv \langle p|\rho|q\rangle = \langle 0|a_q^\dagger a_p|0\rangle \tag{VI.58}$$

lassen sich die beiden Gleichungen (VI.56) und (VI.57) zusammenfassen, indem man die erste Gleichung von links mit $a_q^\dagger$, die zweite von rechts mit $-a_p$ multipliziert und beide addiert:

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\dot{\rho}_{pq} = \langle p|[t,\rho]|q\rangle + \tfrac{1}{2}\sum_{lmn} \{&\bar{v}_{pl,mn}\langle 0|a_q^\dagger a_l^\dagger a_n a_m|0\rangle \\ &- \bar{v}_{mn,ql}\langle 0|a_m^\dagger a_n^\dagger a_l a_p|0\rangle\}.\end{aligned} \tag{VI.59}$$

Hierbei ist $|0\rangle$ zunächst noch der exakte Grundzustand des A-Teilchensystems. In (VI.59) ist die Einteilchendichtematrix mit der Zweiteilchenkorrelationsfunktion verknüpft, für die man in gleicher Weise eine Bewegungsgleichung herleiten kann, in der die Dreiteilchendichtematrix auftritt usf. Das gesamte gekoppelte Gleichungssystem ist dann äquivalent der exakten Schrödingergleichung. Anstatt so vorzugehen, wollen wir jedoch einige Eigenschaften der Zweiteilchendichtematrix ausnutzen, die uns unmittelbar zu einer wesentlichen Vereinfachung von (VI.59) führen werden.

Falls nämlich $|0\rangle$ ein Produktzustand ist, kann man die Zweiteilchendichtematrix durch lauter Einteilchendichtematrizen ausdrücken. Mit

$$|0\rangle \to |0\rangle^b = \left(\prod_{i=1}^{A} b_i^\dagger\right)|0\rangle_0 \tag{VI.60}$$

und

$$a_j^\dagger = \sum_i c_{ji}^* b_i^\dagger \tag{VI.61}$$

(vgl. (AI.22b)) folgt

$$\begin{aligned} {}^b\langle 0|a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta|0\rangle^b &= {}^b\langle 0|a_\alpha^\dagger a_\delta|0\rangle^{b\,b}\langle 0|a_\beta^\dagger a_\gamma|0\rangle^b \\ &\quad - {}^b\langle 0|a_\alpha^\dagger a_\gamma|0\rangle^{b\,b}\langle 0|a_\beta^\dagger a_\delta|0\rangle^b, \end{aligned} \tag{VI.62}$$

was man z.B. durch Einsetzen von (VI.61) (Basiswechsel von der Basis $\{j\}$ zur Basis $\{i\}$) leicht nachprüfen kann.

Eine besonders einfache Gestalt nimmt die Einteilchendichtematrix für den Fall an, daß $c_{ji} = \delta_{ji}$:

$${}^a\langle 0|a_\beta^\dagger a_\alpha|0\rangle^a \equiv \rho_{\alpha\beta}^0 = \rho_\alpha^0 \delta_{\alpha\beta}, \quad \rho_\alpha^0 = \begin{cases} 1 \text{ für } \alpha \text{ besetzt}, \\ 0 \text{ für } \alpha \text{ unbesetzt}. \end{cases} \tag{VI.63}$$

Die Beziehung (VI.62) legt es nahe, eine Näherung einzuführen, die als *Gorkov-Faktorisierung* (Gorkov [Go 58]) der Zweiteilchenkorrelationsfunktion bezeichnet wird:

$$\langle 0|a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta|0\rangle \simeq \rho_{\delta\alpha}\rho_{\gamma\beta} - \rho_{\delta\beta}\rho_{\gamma\alpha}. \tag{VI.64}$$

Sie wird von denselben Argumenten getragen, wie die Quasibosonennäherung im letzten Abschnitt, die ebenfalls dann berechtigt erschien, wenn der exakte Grundzustand $|0\rangle$ näherungsweise durch den Hartree-Fock-Grundzustand $|\text{HF}\rangle$ gegeben war. Auch die Gorkov-Faktorisierung ist also zunächst nur eine ad-hoc-Annahme, deren Gültigkeit am Experiment nachgeprüft werden muß.

Mit der Aufspaltung (VI.64) folgt aus (VI.59) eine neue Bewegungsgleichung für die Einteilchendichte

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho}_{pq} = \sum_m (t_{pm}\rho_{mq} - \rho_{pm}t_{mq}) + \sum_m (V_{pm}\rho_{mq} - \rho_{pm}V_{mq}), \tag{VI.65}$$

die man auch in Matrixform schreiben kann:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [t + V, \rho] = [H_{\text{HF}}(\rho), \rho]. \tag{VI.66}$$

Der Einteilchenoperator V ist hierbei gegeben durch

$$V_{pm} = \sum_{nl} \bar{v}_{pl,mn}\rho_{nl} \tag{VI.67}$$

und stellt genau das in (V.26) definierte selbstkonsistente Hartree-Fock-Potential dar für den Fall, daß ρ der Beziehung (VI.63) genügt. In diesem Fall verschwindet jedoch $\dot{\rho}$, und aus (VI.66) folgt:

$$[H_{\mathrm{HF}}(\rho^0), \rho^0] \equiv [H^0_{\mathrm{HF}}, \rho^0] = 0 \tag{VI.68}$$

mit

$$\begin{aligned} \langle p|H^0_{\mathrm{HF}}|q\rangle &= \langle p|t|q\rangle + \sum_{rs} \langle pr|\bar{v}|qs\rangle \langle s|\rho^0|r\rangle \\ &= \langle p|t|q\rangle + \sum_{r=1}^{A} \langle pr|\bar{v}|qr\rangle . \end{aligned} \tag{VI.69}$$

Die Darstellung, in der sowohl H^0_{HF} als auch ρ^0 diagonal sind, ist identisch mit der durch (V.27) definierten Basis der selbstkonsistenten Hartree-Fock-Einteilchenzustände, d.h. das Verschwinden des Kommutators in (VI.68) ist der Hartree-Fock-Gleichung (V.25) äquivalent. Die Eigenwerte von ρ^0 sind 0 oder 1, entsprechend unbesetzten bzw. besetzten Zuständen.

Ausgehend von der so definierten Basis können wir nun die Frage stellen, mit welchen Frequenzen die Dichte ρ um ihren Gleichgewichtswert ρ^0 schwingt, wenn man ein kleines zeitabhängiges äußeres Störfeld $\eta\, W(t)$ auf das System einwirken läßt. Dabei soll ρ weiterhin in der Nähe von ρ^0 liegen, d.h., wir verlangen, daß ρ genauso wie für Determinantenzustände ein Projektionsoperator mit

$$\rho^2 = \rho \tag{VI.70}$$

sein soll (vgl. Anhang III), in Konsistenz mit den Näherungen (VI.44) und (VI.64). Für $\eta \to 0$ entsprechen diese Frequenzen genau den Eigenfrequenzen des Systems, sofern der Gleichgewichtszustand wirklich so beschaffen ist, daß der Limes Störfeld gegen Null durchgeführt werden kann, d.h., sofern der Gleichgewichtszustand ein absolutes Minimum und nicht etwa einen Sattelpunkt oder ein relatives Minimum darstellt. Sei der hermitesche Operator der äußeren Störung gegeben durch:

$$W(t) = W \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + W^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \tag{VI.71}$$

dann können wir die Dichte $\rho(t)$ nach Potenzen von η entwickeln:

$$\rho_{pq}(t) = \rho^0_p \delta_{pq} + \eta\, \rho^1_{pq}(t) + 0(\eta^2) \tag{VI.72a}$$

mit

$$\rho^1(t) = \rho^1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \rho^{1\dagger} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{VI.72b}$$

Aus der Ableitung von (VI.66) folgt, daß man jetzt statt $H_{\mathrm{HF}}(\rho)$ den Operator $\bar{H}$

$$\bar{H} = H_{\mathrm{HF}}(\rho) + \eta\, W(t) \tag{VI.73}$$

in die Bewegungsgleichung einsetzen muß, wobei man konsequenterweise in $H_{\mathrm{HF}}(\rho)$ die Entwicklung (VI.72a) verwendet:

$$H_{\mathrm{HF}}(\rho) = H^0_{\mathrm{HF}} + \eta H^1(t), \tag{VI.74}$$

$$\langle p|H^1(t)|q\rangle = \sum_{rs} \langle pr|\bar{v}|qs\rangle \langle s|\rho^1(t)|r\rangle . \tag{VI.75}$$

Mit den so definierten Größen und unter Benutzung von (VI.68) erhält die Bewegungsgleichung (VI.66) schließlich die bezüglich η linearisierte Form:

$$i\hbar \dot{\rho}^1_{pq}(t) = [H^0_{\mathrm{HF}}, \rho^1(t)]_{pq} + [H^1(t), \rho^0]_{pq} + [W(t), \rho^0]_{pq} . \tag{VI.76}$$

Wir können die Koeffizienten von $e^{-i\omega t}$ und $e^{i\omega t}$ getrennt vergleichen (die beiden Funktionen sind linear unabhängig):

$$\hbar\omega \rho^1_{pq} = (\varepsilon_p - \varepsilon_q)\rho^1_{pq} + (\rho^0_q - \rho^0_p)\left\{\sum_{rs} \bar{v}_{pr,qs}\rho^1_{sr} + W_{pq}\right\}, \tag{VI.77a}$$

$$-\hbar\omega \rho^{1*}_{qp} = (\varepsilon_p - \varepsilon_q)\rho^{1*}_{qp} + (\rho^0_q - \rho^0_p)\left\{\sum_{rs} \bar{v}_{pr,qs}\rho^{1*}_{rs} + W^*_{qp}\right\}. \tag{VI.77b}$$

Matrixelemente von ρ^1 zwischen zwei Zuständen, die im Hartree-Fock-Grundzustand entweder beide besetzt (i,j) oder beide unbesetzt (m,n) sind, verschwinden (dies läßt sich zeigen, indem man in die Beziehung (VI.70) die Entwicklung (VI.72a) einsetzt und bezüglich η linearisiert). Berücksichtigt man, daß ρ^0_q, ρ^0_p nur die Werte 0 oder 1 annehmen können, so folgt mit den Abkürzungen

$$\rho^1_{mi} \equiv x_{mi}, \quad \rho^1_{im} \equiv y_{mi}, \quad \varepsilon_{mi} = \varepsilon_m - \varepsilon_i \tag{VI.78}$$

für verschwindende äußere Störung:

$$(\hbar\omega - \varepsilon_{mi})x_{mi} = \sum_{nj}(\bar{v}_{mj,in}x_{nj} + \bar{v}_{mn,ij}y_{nj}), \tag{VI.79a}$$

$$-(\hbar\omega + \varepsilon_{mi})y_{mi} = \sum_{nj}(\bar{v}_{ni,jm}y_{nj} + \bar{v}_{ij,mn}x_{nj}). \tag{VI.79b}$$

Diese Gleichungen sind identisch mit den RPA-Gleichungen (VI.47). Damit erhalten die Anregungsenergien E_ν, die sich aus (VI.47) bestimmen, eine recht anschauliche Bedeutung: Sie entsprechen den Energien der Eigenschwingungen des A-Nukleonensystems, die den Hartree-Fock-Grundzustand als Gleichgewichtszustand besitzen.

8. Erweitertes schematisches Modell und Summenregeln

Abschätzung der Anregungsenergien. Um ohne numerische Rechnungen qualitativ einsehen zu können, in welcher Weise die durch die RPA be-

rücksichtigten Grundzustandskorrelationen die im Rahmen der Tamm-Dancoff-Methode gewonnenen Ergebnisse verändern, verfahren wir ganz ähnlich wie beim schematischen Modell. Dazu verwenden wir als äußere Störung ein Multipolfeld der Ordnung I und der Frequenz ω

$$W(t) = D^{(I)} e^{-i\omega t} + D^{(I)\dagger} e^{i\omega t} \tag{VI.80}$$

und denken uns analog zu (VI. 12a, b) die Teilchen-Loch-Zustände zum Gesamtdrehimpuls I und zum Gesamtisospin T gekoppelt. Ebenso wie in den früheren Betrachtungen zum schematischen Modell werden wir folgende Ersetzung vornehmen, die uns zum *erweiterten schematischen Modell* führen wird:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{mj,in} &\to \lambda^{(I)} D^{(I)}_{mi} D^{(I)*}_{nj}, \\ \bar{v}_{mn,ij} &\to \lambda^{(I)} D^{(I)}_{mi} D^{(I)}_{jn}. \end{aligned} \tag{VI.81}$$

Setzen wir (VI.80) und (VI.81) in (VI.77a) ein (der obere Index I sei im folgenden weggelassen)

$$(\hbar\omega - \varepsilon_{pq})\rho^1_{pq} = (\rho^0_q - \rho^0_p)\left\{\sum_{rs} \lambda D^*_{sr} \rho^1_{sr} + 1\right\} D_{pq}, \tag{VI.82}$$

so kann man die sog. *lineare Antwortfunktion*

$$R(\omega) = \sum_{rs} D^*_{sr} \rho^1_{sr}(\omega + i\varepsilon) = \mathrm{Sp}[D^\dagger \rho^1] \tag{VI.83}$$

einführen (ε ist positiv und infinitesimal). Im folgenden soll gezeigt werden, daß die Pole von $R(\omega)$ die Anregungsenergien des Systems wiedergeben, während $\mathrm{Im}\,R(\omega)$ mit der totalen Übergangswahrscheinlichkeit (in 1. Diracscher Störungsrechnung) verknüpft ist

$$-2\,\mathrm{Im}\,R(\omega) = 2\pi \sum_{\nu \neq 0} |\langle \nu | D | 0 \rangle|^2 \, \delta(\hbar\omega - E_\nu), \tag{VI.84}$$

wobei $|\nu\rangle$ die exakten Zustände und E_ν die exakten Energien sind.

Schreibt man zu diesem Zweck die zeitabhängige Dichtematrix im Schrödingerbild als

$$\rho_{pq}(t) = \langle \Psi_0(t) | a^\dagger_q a_p | \Psi_0(t) \rangle \tag{VI.85}$$

und berechnet die zeitliche Entwicklung des exakten Grundzustands aufgrund der äußeren Störung in 1. Ordnung Diracscher Störungstheorie

$$|\Psi_0(t)\rangle = |0\rangle + \eta \sum_{\nu \neq 0} |\nu\rangle \left\{ \frac{\langle \nu | D | 0 \rangle}{\hbar\omega - E_\nu + i\varepsilon} e^{-i\omega t} - \frac{\langle \nu | D^\dagger | 0 \rangle}{\hbar\omega + E_\nu + i\varepsilon} e^{i\omega t} \right\}, \tag{VI.86}$$

so kann man die Dichtematrix bis zur 1. Ordnung in η aus (VI.86) ausrechnen

$$\rho_{pq}(t) = \rho_{pq}(0) + \eta(\rho^1_{pq} e^{-i\omega t} + \rho^{1*}_{qp} e^{i\omega t}) + 0(\eta^2), \tag{VI.87}$$

womit schließlich für die lineare Antwortfunktion folgt:

$$R(\omega)=\mathrm{Sp}(D^{\dagger}\rho^{1})=\sum_{\nu\neq 0}\left\{\frac{|\langle\nu|D|0\rangle|^{2}}{\hbar\omega-E_{\nu}+\mathrm{i}\varepsilon}-\frac{|\langle\nu|D|0\rangle|^{2}}{\hbar\omega+E_{\nu}+\mathrm{i}\varepsilon}\right\}. \quad \text{(VI.88)}$$

Hieraus wird sofort die Bedeutung der Pole von $R(\omega)$ klar. Mit der Beziehung

$$\frac{1}{\omega+\mathrm{i}\varepsilon}=\mathrm{P}\,\frac{1}{\omega}-\mathrm{i}\pi\,\delta(\omega) \quad \text{(VI.89)}$$

läßt sich auch (VI.84) verifizieren (P bedeutet Hauptwert).

Wir können in (VI.82) ρ^1 durch die Antwortfunktion ausdrücken:

$$R(\omega)=\sum_{pq}\frac{\rho_q^0(1-\rho_p^0)-\rho_p^0(1-\rho_q^0)}{\hbar\omega-\varepsilon_{pq}+i\varepsilon}\,|D_{pq}|^2\{\lambda R(\omega)+1\}. \quad \text{(VI.90)}$$

Nennt man die Antwortfunktion bei verschwindender Restwechselwirkung ($\lambda=0$) $R_0(\omega)$, so folgt

$$R(\omega)=R_0(\omega)\{1+\lambda R(\omega)\} \quad \text{(VI.91a)}$$

oder:

$$R(\omega)=\frac{R_0(\omega)}{1-\lambda R_0(\omega)}. \quad \text{(VI.91b)}$$

Die Pole ω_ν von R sind im erweiterten schematischen Modell also gegeben durch:

$$\frac{1}{\lambda}=R_0(\omega_\nu)=\sum_{mi}|D_{mi}|^2\left\{\frac{1}{\hbar\omega_\nu-\varepsilon_{mi}}-\frac{1}{\hbar\omega_\nu+\varepsilon_{mi}}\right\}. \quad \text{(VI.92a)}$$

(Die infinitesimale Größe $\mathrm{i}\varepsilon$ kann hier weggelassen werden, da $\hbar\omega_\nu\neq\pm\varepsilon_{mi}$).

(VI.92a) kann man auch in der Form schreiben:

$$\frac{1}{\lambda}=\sum_{mi}|D_{mi}|^2\,\frac{2\varepsilon_{mi}}{(\hbar\omega_\nu)^2-\varepsilon_{mi}^2}. \quad \text{(VI.92b)}$$

Wir können diese Dispersionsgleichung ebenfalls wie im Tamm-Dancoff-Fall graphisch lösen (Fig. 34).

Vergleicht man Fig. 34 mit Fig. 32, so erkennt man zwei qualitative Unterschiede, die durch die Berücksichtigung von Grundzustandskorrelationen bewirkt werden:

a) Falls die Restwechselwirkung stärker als ein bestimmter kritischer Wert ist ($\lambda>\lambda_{\mathrm{kr}}$), wird die Energie des nach unten verschobenen Zustands imaginär;

b) der ($T=0$)-Zustand wird für gleiche Wechselwirkungsstärke λ stärker nach unten verschoben. Am entarteten Fall kann man diesen Sachverhalt noch etwas besser studieren. Setzt man nämlich alle ε_{mi} gleich ε, so folgt aus (VI.92b):

$$E_{\text{kollektiv}} = \left(\varepsilon^2 + 2\varepsilon\lambda \sum_{mi} |D_{mi}|^2\right)^{1/2}. \quad \text{(VI.93a)}$$

Im entarteten Fall ergibt sich also λ_{kr} zu:

$$\lambda_{\text{kr}} = -\frac{\varepsilon}{2\sum_{mi} |D_{mi}|^2}. \quad \text{(VI.93b)}$$

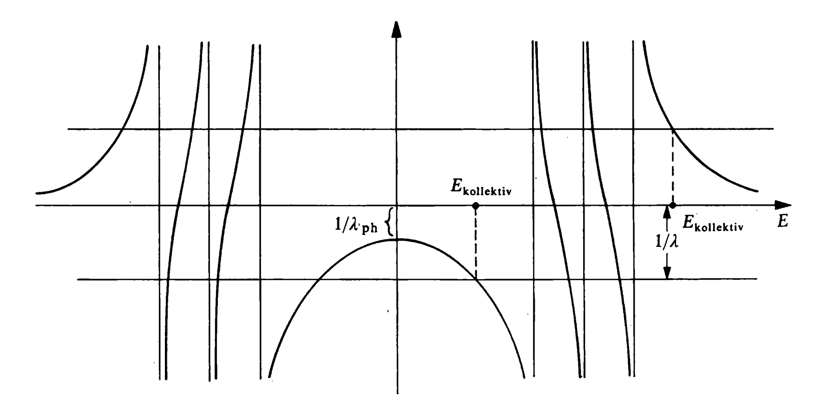


Fig. 34 Graphische Lösung der Dispersionsgleichung (VI.92b).

Diese Stelle kann man als Phasenübergang deuten (siehe z. B. Thouless [Th2 60]), bei dem sich der sphärische Kern stabil deformiert. Ein Vergleich mit dem Tamm-Dancoff-Fall zeigt, daß

$$E^{\text{TD}}_{\text{kollektiv}}(\lambda_{\text{kr}}) = \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{(VI.93c)}$$

und

$$E^{\text{TD}}_{\text{kollektiv}}(2\lambda_{\text{kr}}) = 0, \quad \text{(VI.93d)}$$

d.h., erst bei doppelter Stärke der Restwechselwirkung tritt in einem Modell ohne Grundzustandskorrelationen der Phasenübergang ein.

Dipolsummenregel. Ein weiterer Erfolg der RPA besteht darin, daß die im Tamm-Dancoff-Modell verletzte Dipolsummenregel, deren Gültigkeit gewissermaßen eine Konsistenzforderung an das benutzte Modell darstellt, jetzt den durch (VI.9) gegebenen exakten Wert erhält.

Dies läßt sich folgendermaßen zeigen (Mikeska [Mk 64]). Aus (VI.84) und (VI.9) ergibt sich:

$$\int_0^\infty \sigma(\omega)\,\mathrm{d}\omega \sim \int_0^\infty \mathrm{Im}\,R(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega. \tag{VI.94}$$

Da die Dipolsumme im Schalenmodell erhalten ist (vgl. (VI.37)), müssen wir lediglich folgende Identität beweisen:

$$\int_0^\infty \mathrm{Im}\,R_0(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega = \int_0^\infty \mathrm{Im}\,R(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega. \tag{VI.95}$$

Aus dem in (VI.91a) gegebenen Zusammenhang zwischen $R(\omega)$ und $R_0(\omega)$ ergibt sich eine zu (VI.95) äquivalente Forderung:

$$\int_0^\infty \omega\,\mathrm{Re}\,R(\omega)\,\mathrm{Im}\,R_0(\omega)\,\mathrm{d}\omega + \int_0^\infty \omega\,\mathrm{Re}\,R_0(\omega)\,\mathrm{Im}\,R(\omega)\,\mathrm{d}\omega = 0. \tag{VI.96}$$

Zum weiteren Beweis benutzen wir die Tatsache, daß die Integranden in (VI.96) gerade Funktionen von ω sind. Aus (VI.90), (VI.91a) folgt nämlich durch Zerlegen von R_0 nach Real- und Imaginärteil

$\mathrm{Im}\,R_0(\omega)$: ungerade in ω,
$\mathrm{Re}\,R_0(\omega)$: gerade in ω.

Aus (VI.91b) gewinnt man

$$\mathrm{Im}\,R(\omega) = \frac{\mathrm{Im}\,R_0(\omega)}{(1-\lambda\,\mathrm{Re}\,R_0(\omega))^2 + (\lambda\,\mathrm{Im}\,R_0(\omega))^2} \tag{VI.97a}$$

$$\mathrm{Re}\,R(\omega) = \frac{\mathrm{Re}\,R_0(\omega) - \lambda(\mathrm{Re}^2\,R_0(\omega) + \mathrm{Im}^2\,R_0(\omega))}{(1-\lambda\,\mathrm{Re}\,R_0(\omega))^2 + (\lambda\,\mathrm{Im}\,R_0(\omega))^2} \tag{VI.97b}$$

und damit:

$\mathrm{Im}\,R(\omega)$: ungerade in ω,
$\mathrm{Re}\,R(\omega)$: gerade in ω.

In (VI.96) können also die Integrale von $-\infty$ bis $+\infty$ erstreckt werden.

Zum anderen nutzen wir aus, daß die Pole von R_0 und R nur in der unteren Halbebene liegen. Damit ist R_0 (bzw. R) in der oberen Halbebene analytisch, und mit dem Cauchyschen Integralsatz ergibt sich (da R_0 stärker als $1/\omega$ gegen Null geht für $\omega \to \infty$):

$$R_0(\omega + \mathrm{i}\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R_0(\omega')}{\omega' - \omega - \mathrm{i}\varepsilon}\,\mathrm{d}\omega'. \tag{VI.98a}$$

Mit (VI.89) folgt daraus:

$$R_0(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \, \mathrm{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R_0(\omega')}{\omega' - \omega} \, d\omega' + \tfrac{1}{2} R_0(\omega) \qquad \text{(VI.98b)}$$

oder

$$R_0(\omega) = \frac{1}{i\pi} \, \mathrm{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R_0(\omega')}{\omega' - \omega} \, d\omega', \qquad \text{(VI.98c)}$$

$$\mathrm{Re}\, R_0(\omega) = \frac{1}{\pi} \, \mathrm{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\, R_0(\omega')}{\omega' - \omega} \, d\omega'. \qquad \text{(VI.98d)}$$

Damit schreibt sich die linke Seite von (VI.96):

$$\int_0^{\infty} \omega [\mathrm{Im}\, R(\omega) \mathrm{Re}\, R_0(\omega) + \mathrm{Im}\, R_0(\omega) \mathrm{Re}\, R(\omega)] \, d\omega$$

$$= \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \omega \left[\frac{\mathrm{Im}\, R(\omega) \mathrm{Im}\, R_0(\omega')}{\omega' - \omega} + \frac{\mathrm{Im}\, R_0(\omega) \mathrm{Im}\, R(\omega')}{\omega' - \omega} \right] d\omega \, d\omega'$$

$$= \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\omega \, \mathrm{Im}\, R(\omega) \mathrm{Im}\, R_0(\omega')}{\omega' - \omega} + \frac{\omega' \, \mathrm{Im}\, R_0(\omega') \mathrm{Im}\, R(\omega)}{\omega - \omega'} \right] d\omega \, d\omega'$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Im}\, R(\omega) \, d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Im}\, R_0(\omega') \, d\omega' = 0, \quad \text{q.e.d.} \qquad \text{(VI.99)}$$

Im Gegensatz zum Tamm-Dancoff-Modell, in dem sich die Dipolsumme als zu klein ergibt, führt also die Mitnahme von Korrelationen im Grundzustand zu einer Vergrößerung der Übergangswahrscheinlichkeiten.

Im Falle der $(3^-, T=0)$-Zustände wird, wie man z. B. im entarteten Modell qualitativ leicht nachprüft (Brown et al. [BE 61]), die Übergangswahrscheinlichkeit um einen Faktor 2 bis 4 erhöht.

9. Geisterzustände

Allgemeines. Der Zustand eines quantenmechanischen Systems ist gekennzeichnet durch die Eigenwerte eines Systems von Konstanten der Bewegung, d.h., von untereinander vertauschbaren Operatoren, deren Minuskommutatoren mit dem Hamiltonoperator verschwinden. Solche allgemeingültigen Symmetrien entsprechenden Erhaltungsgrößen

(vgl. Kapitel IV) sind in einem A-Nukleonensystem z.B. Gesamtimpuls, Gesamtdrehimpuls, Teilchenzahl. Wie bereits in Kapitel I erwähnt, wird der Gesamtimpuls im Schalenmodell nicht erhalten. Ebenso verletzt das Nilsson-Modell die Drehinvarianz, und das in Kapitel VII diskutierte Superflüssigkeitsmodell benutzt Modellzustände mit unscharfer Teilchenzahl.

Die Anregungsspektren und Übergangswahrscheinlichkeiten, die man mit solchen Modellen berechnet, werden durch das Auftreten sog. *Geisterzustände* („spurious states") verfälscht, die z.B. einer Translation oder Rotation des Kerns als Ganzem entsprechen und keiner wirklichen inneren Anregung. Es ist eine Eigenschaft der RPA, daß die Anregungsenergien dieser Scheinzustände sich zu Null ergeben (s. u.).

Translationsinvarianz. Um diesen Effekt am Beispiel der Translation studieren zu können, betrachten wir eine infinitesimale Translation δz, deren erzeugender Operator gegeben ist durch:

$$T_{\delta z} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta z P_z} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta z P_z \tag{VI.100a}$$

mit

$$P_z = \sum_{\alpha\beta} \langle\alpha|p_z|\beta\rangle a_\alpha^\dagger a_\beta . \tag{VI.100b}$$

Die durch eine Translation des Systems bewirkte Änderung der stationären Einteilchendichte

$$\rho^0 \to \rho^0 + \rho^1 \tag{VI.101}$$

kann durch $T_{\delta z}$ ausgedrückt werden:

$$\rho^1 = T_{\delta z}^\dagger \rho^0 T_{\delta z} - \rho^0 . \tag{VI.102}$$

Mit (VI.100a, b) folgt daraus:

$$\rho^1 = \frac{i}{\hbar}\delta z[\rho^0, P_z] . \tag{VI.103}$$

Wegen $\dot{\rho}^0 = 0$ und

$$[P_z, H] = 0 \tag{VI.104}$$

ist ρ^1 zeitlich konstant:

$$\dot{\rho}^1 = \frac{i}{\hbar}\delta z[\rho^0, \dot{P}_z] = \frac{\delta z}{\hbar^2}[\rho^0,[P_z,H]] = 0 . \tag{VI.105}$$

Aus der Bewegungsgleichung (VI.66) für die Einteilchendichte ergibt sich damit zusammen mit der Definition (VI.75)

$$0 = [\rho^0, H^1] + [\rho^1, H_{\mathrm{HF}}^0] , \tag{VI.106}$$

wenn man nur lineare Terme berücksichtigt.

Dies liefert sofort

$$\rho^1_{pq} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta z \sum_l \left[\rho^0_{pl}(p_z)_{lq} - (p_z)_{pl}\,\rho^0_{lq}\right], \tag{VI.107a}$$

$$\rho^1_{pq} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta z(\rho^0_p - \rho^0_q)\,(p_z)_{pq}, \tag{VI.107b}$$

und mit

$$\rho^1_{\text{Teilchen,Teilchen}} = \rho^1_{\text{Loch,Loch}} = 0 \tag{VI.108}$$

folgt:

$$\begin{aligned}
[\rho^1, H^0_{\text{HF}}]_{mi} &= \sum_l \{\rho^1_{ml}[t_{li} + V_{li}(\rho^0)] - [t_{ml} + V_{ml}(\rho^0)]\,\rho^1_{li}\} \\
&= (\varepsilon_i - \varepsilon_m)\,\rho^1_{mi} \\
&= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta z(\varepsilon_i - \varepsilon_m)\,(p_z)_{mi}
\end{aligned} \tag{VI.109}$$

und

$$\begin{aligned}
[\rho^0, H^1]_{mi} &= \sum_r [\rho^0_{mr}\,V_{ri}(\rho^1) - V_{mr}(\rho^1)\,\rho^0_{ri}] \\
&= -\sum_{sl} \bar{v}_{ml,is}\,\rho^1_{sl} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta z \sum_{nj} [\bar{v}_{mj,in}(p_z)_{nj} - \bar{v}_{mn,ij}\,(p_z)^*_{nj}].
\end{aligned} \tag{VI.110}$$

Mit den Abkürzungen (VI.49) kann man (VI.106), (VI.109) und (VI.110) auch in der Form

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_z \\ -P^*_z \end{pmatrix} = 0 \tag{VI.111}$$

schreiben, d.h.,ein Zustand

$$|\bar{v}\rangle = \sum_{mi} [(p_z)_{mi}\,a^\dagger_m a_i + (p_z)_{im}\,a^\dagger_i a_m]\,|0\rangle \tag{VI.112}$$

hat in der RPA die Anregungsenergie $\hbar\omega = 0$. Im Rahmen des zeitabhängigen Hartree-Fock-Verfahrens kann man dieses Ergebnis so deuten, daß für gewisse kollektive Bewegungen keine rücktreibende Kraft besteht. Das ist z.B. der Fall, wenn man einen lokalisierten Zustand im Raum verschiebt oder wenn man einen nicht sphärisch symmetrischen Zustand dreht. Solche Scheinanregungen sind also in der RPA mit dem Grundzustand entartet. Man kann sogar zeigen, daß $|\bar{v}\rangle$ bis auf Normierung näherungsweise mit dem Grundzustand identisch ist. Mit (VI.100b) gilt nämlich:

$$|\bar{v}\rangle \simeq P_z|0\rangle\,. \tag{VI.113}$$

Projiziiert man aus $|\bar{\nu}\rangle$ einen Zustand mit einem scharfen Impuls in z-Richtung heraus (vgl. Kapitel X), so zeigt sich, daß der Projektionsoperator mit P_z vertauscht und damit

$$|\bar{\nu}\rangle \simeq \text{const}\,|0\rangle \qquad \text{(VI.114)}$$

folgt.

Die Beziehung (VI.111) ist natürlich exakt nur solange richtig, als selbstkonsistente Einteilchenzustände und -energien benutzt werden. Anderenfalls treten die Geisterzustände bei endlichen Energien auf. Sie können entfernt werden, wenn man (VI.111) als Bedingungsgleichung für die Wahl der Restwechselwirkung auffaßt (siehe z.B. Gillet und Vinh Mau [GV 62]).

10. Vergleich mit dem Experiment

Auf der Basis der Tamm-Dancoff- bzw. RPA-Methode sind inzwischen für eine Reihe von Kernen mit abgeschlossenen Schalen (C^{12}, O^{16}, Ca^{40}, Pb^{208}) Rechnungen zur Bestimmung kollektiver Schwingungszustände

Tab. 7 Zustände negativer Parität (E in MeV) und ihre relativen Übergangswahrscheinlichkeiten (in %) für γ-Strahlung in O^{16}, berechnet mit der TD-Methode und in RPA ([GV 62]).

	$T=0$				$T=1$			
	TD		RPA		TD		RPA	
	E	%	E	%	E	%	E	%
0^-	23,1	–	23	–	25,7	–	25,7	–
	11,2	–	11,2	–	13,7	–	13,7	–
1^-	22,4	0,6	22,4	0,4	25,4	26,0	25,2	19,8
	16,7	0,4	16,6	0,2	22,6	67,9	22,2	72,9
	15,0	0,4	15,0	0,2	19,7	2,1	19,5	2,4
	10,0	17,6	9,9	8,0	18,1	1,0	18,1	1,3
	6,2	81,0	4,7	91,2	13,5	3,0	13,5	3,6
2^-	21,7	12,5	21,6	12,5	23,7	14,8	23,7	14,4
	17,3	16,1	17,3	17,2	20,2	49,6	20,1	48,7
	16,6	39,8	16,6	38,9	19,1	11,4	19,1	12,8
	14,6	6,6	14,6	7,2	17,7	0,4	17,6	0,3
	10,6	25,0	10,5	24,2	13,0	23,8	12,9	23,8
3^-	20,3	12,7	20,1	8,1	24,2	41,6	24,1	41,5
	15,3	19,6	15,1	13,7	18,5	28,1	18,5	28,1
	7,5	67,7	6,2	78,2	12,8	30,3	12,7	30,4

durchgeführt worden (vgl. die ausführliche Diskussion in dem Buch von A. M. Lane [La 64], S. 143 ff.). Wir wollen uns hier auf die Besprechung einiger Ergebnisse beschränken, die man als typisch ansehen kann. Insbesondere werden wir die Auswirkung von Grundzustandskorrelationen auf die Riesenresonanzzustände und auf die tiefliegenden ($T=0$)-Zustände betrachten.

Gillet et al. konnten zeigen ([GV 62], [Gi 64], [GV 64], [GS 64]), daß – wie früher bereits erwähnt – die RPA gegenüber der Tamm-Dancoff-Methode bei den ($T=1$)-Zuständen negativer Parität keine wesentlichen Änderungen der Ergebnisse erbringt, daß jedoch sowohl die Energien als auch die Übergangswahrscheinlichkeiten der tiefliegenden ($T=0$)-Zustände durch die Berücksichtigung der Grundzustandskorrelationen in

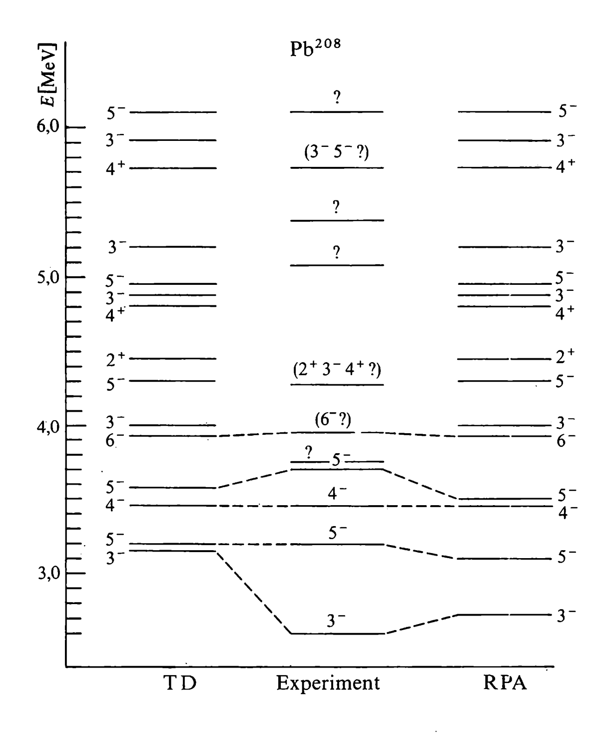


Fig. 35 Niedrig liegende kollektive Anregungen in Pb^{208} (Vergleich von Experimenten und Rechnungen in TD und RPA); Gillet [Gi 64].

einer wesentlich besseren Übereinstimmung mit den experimentellen Werten berechnet werden können.

Hierzu vergleiche man Tab. 7, wo dieser Sachverhalt für O^{16} wiedergegeben ist, und Fig. 35, in der Pb^{208} diskutiert ist. Insbesondere wird z. B. die Übergangswahrscheinlichkeit des (3^-)-Niveaus vom 8,8-fachen der Weisskopfabschätzung (vgl. (II. 64)) auf das 17,8-fache vergrößert, was einer Übergangswahrscheinlichkeit von $2{,}2 \times 10^{10}\,\text{sec}^{-1}$ entspricht (gegen $3{,}6 \pm 1{,}1 \times 10^{10}\,\text{sec}^{-1}$ aus dem Experiment).

VII. SUPERFLÜSSIGKEITSMODELL

1. Einleitung und experimenteller Überblick

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, wie bei Kernen mit abgeschlossenen Schalen im wesentlichen durch die Diagonalisation des Teilchen-Loch-Anteils der gesamten Restwechselwirkungsmatrix die kollektiven Vibrationszustände erklärt werden konnten. Die exakte Diagonalisation eines anderen Teils der Restwechselwirkung, welcher durch die dem Superflüssigkeits- oder Paarungsmodell zugrundeliegende physikalische Vorstellung abgesteckt wird, ermöglicht das Verständnis einer Reihe weiterer Effekte, die in einem Modell sich unabhängig bewegender Nukleonen nicht erklärt werden können.

a) *Energielücke.* Die Anregungsspektren deformierter Kerne weisen einen charakteristischen Unterschied zwischen gerader und ungerader Nukleonenzahl auf. Während gerade Kerne im Bereich bis zu 1,5 MeV über dem Grundzustand nur sehr wenige angeregte Zustände besitzen, die sich durchwegs als Glieder der zum Grundzustand gehörigen Rotationsbande (bis auf einen, s.u.) verstehen lassen, gibt es bei ungeraden Kernen viele Niveaus in diesem Energiebereich und keineswegs nur Rotationszustände. In Fig. 36 ist für die Isotope von Zinn dieses Verhalten gezeigt.

b) *Termdichte.* Nimmt man an, daß sich in einer j-Schale nur einige Nukleonen befinden, so lassen sich – wie man sich leicht überlegt – sehr viele Zustände konstruieren, die alle miteinander energetisch entartet sind. Schätzt man auf diese Weise die Zahl der Zustände pro Energieeinheit ab, so ergibt sich, daß im Bereich der niedrigliegenden Anregungen die Termdichte gegenüber dem Experiment etwa um einen Faktor 2 zu hoch ist.

c) *even-odd-Effekt.* Bestimmt man die Gesamtbindungsenergie eines ungeraden Kerns, so ist diese kleiner als das arithmetische Mittel aus den Bindungsenergien der beiden benachbarten geraden Kerne, d. h. die Massen benachbarter Kerne verhalten sich wie folgt:

$$M_{(A\,\text{ungerade})} > \frac{M_{A-1} + M_{A+1}}{2}.$$

Diese Erscheinung wird als even-odd-Effekt bezeichnet.

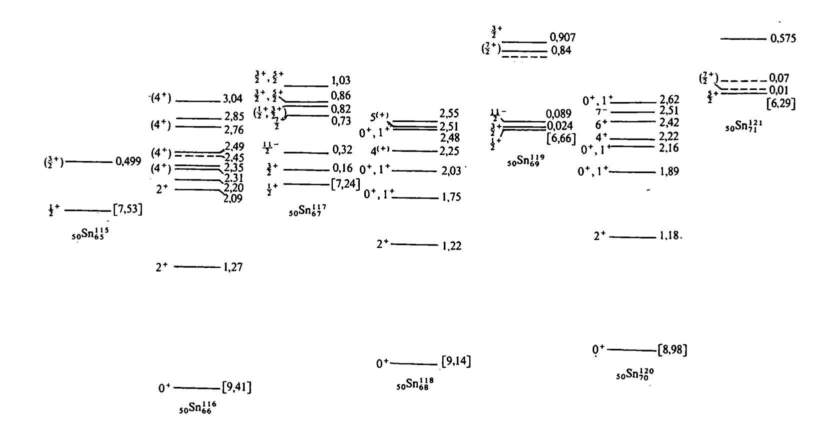


Fig. 36 Anregungsspektren von $_{50}$Sn-Isotopen.
Die Zahlen rechts neben den Anregungsniveaus bedeuten Anregungsenergien in MeV relativ zum Grundzustand.
Die Zahl in eckiger Klammer neben dem Grundzustand gibt die Ablösearbeit des letzten Neutrons an. Die Zahlen links von den Zuständen stehen für Gesamtdrehimpuls und Parität. (Aus Landolt-Boernstein [LB 61].)

d) *Trägheitsmomente.* Das durch Gleichung (III. 1) definierte Trägheitsmoment wird in Kapitel IX berechnet werden. Es ergibt sich, daß die im Schalenmodell ermittelten Werte die gemessenen etwa um einen Faktor 2 überschreiten, während sich mit Einschluß von Paarungseffekten die richtigen Größenordnungen ergeben.

e) *Deformationen.* Berechnet man sich nach dem Schalenmodell die Dichteverteilung der Nukleonen als Funktion der Massenzahl, so findet man, daß sie sich – beginnend mit einer kugelsymmetrischen Verteilung bei abgeschlossenen Schalen – stetig von schwacher zu starker Deformation ändert. In Wirklichkeit sind die Kerne, deren Nukleonenzahlen nur wenig von den magischen Zahlen abweichen, zumindest im Grundzustand immer noch kugelförmig. Dann kommt ein Übergangsbereich, in dem die Deformation sehr rasch zunimmt, um in der Mitte zwischen abgeschlossenen Schalen etwa ihren Maximalwert zu erreichen.

f) *Tiefliegendes* 2^+*-Niveau.* In der Umgebung abgeschlossener Schalen tritt bei geraden Kernen ein tiefliegendes Niveau mit Drehimpuls $I=2$ und positiver Parität auf (siehe Fig. 36), das weder als Rotationsniveau, noch als Einteilchenanregung zu deuten ist.

Um diese Phänomene verstehen zu können, müssen wir – wie oben schon erwähnt – die Korrelationen berücksichtigen, die aufgrund der starken und kurzreichweitigen Kernkräfte zwischen den Nukleonen bestehen. Ausgehend von der in Kapitel I besprochenen Tatsache, daß gerade Kerne einen Grundzustandsdrehimpuls $I_0=0$ besitzen und bei fast allen ungeraden Kernen I_0 durch den Einteilchendrehimpuls des ungeraden Nukleons bestimmt wird, zeigen Rechnungen von Mayer [Ma 50], daß bei kurzreichweitigen anziehenden Zweiteilchenkräften die Kopplung von beispielsweise zwei Nukleonen in einer j-Schale zu einem ($I=0$)-Paar energetisch bevorzugt ist. In einem klassischen Vergleichsbild ist dies unmittelbar einzusehen, da sich zwei Teilchen in einem ($I=0$)-Zustand in gewissen Zeitabständen sehr nahe kommen, während dies für höhere Drehimpulse nicht der Fall ist (für eine genauere Diskussion siehe Mottelson [Mo 58]). Wir werden also versuchen, den Teil der Restwechselwirkung zu diagonalisieren, der nur zwischen zwei zu $I=0$ gekoppelten Nukleonen wirkt. Diese spezielle Paarwechselwirkung wird sich nur in Kernen mit unabgeschlossenen j-Schalen wesentlich bemerkbar machen, da dort für die Nukleonen relativ große Freiheit besteht, sich zu Paarzuständen $|n\,l\,j\,j\,I\,M\rangle$ mit $I=0$ zu koppeln. Der Winkelanteil dieser Zustände ist nämlich bis auf Faktoren gegeben durch:

$$\langle \Omega_1\, \Omega_2 | n\,l\,j\,j\,I=0\,M=0\rangle \sim \sum_{m=-l}^{l} (-1)^m\, Y_{lm}(\Omega_1)\, Y_{l-m}(\Omega_2).$$

Je stärker die Summe über m bei Vorhandensein mehrerer Teilchen aufgrund des Pauliprinzips beschränkt ist, desto weniger ist die Kopplung zweier Nukleonen zu einem $(I=0)$-Paar erfüllt, d.h., desto weniger kann die Paarkraft zwischen ihnen wirksam sein.

In Bereichen zwischen abgeschlossenen Schalen wird also für einen geraden bzw. ungeraden Kern die energetisch günstigste Konfiguration diejenige sein, bei der alle Nukleonen bzw. alle bis auf eines abgepaart sind. Um bei geraden Kernen eine Anregung zu erzeugen, muß demnach mindestens die Bindungsenergie eines Paares aufgebracht werden, während dies bei ungeraden Kernen aufgrund des einen unabgepaarten Nukleons nicht notwendig ist. Es wird dadurch qualitativ der unterschiedliche Energieabstand zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand bei geraden und ungeraden Kernen verständlich. Die Größenordnung dieser Energielücke (energy gap) liegt bei $1-2$ MeV. Während die Berücksichtigung der Restwechselwirkung bei den in Kapitel VI behandelten Vibrationen zu einer Verschiebung der Anregungsenergien führte, bleiben bei dem Effekt der Paarung die Anregungszustände relativ unbeeinflußt, und die Grundzustandsenergie wird abgesenkt (siehe Fig. 36).

Auch die anderen oben erwähnten Effekte lassen sich in diesem Modell qualitativ verstehen. Durch die Vergrößerung der Energieabstände bei geraden Kernen wird hinsichtlich der Niveaudichte eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt, und auch der even-odd-Effekt ist unmittelbar einsichtig.

Die Existenz von $(I=0)$-Paaren begünstigt eine Kugelgestalt des Kerns, da durch sie keine Richtung im Raum ausgezeichnet wird. Die Kerne in der Nähe abgeschlossener Schalen werden deshalb noch Kugelgestalt haben, da der Einfluß der Paarkraft die Deformationstendenz überwiegt, während weiter weg von abgeschlossenen Schalen sich die Verhältnisse gerade umkehren. Dies hängt, wie genauere Untersuchungen zeigen, sehr empfindlich von der Stärke der Paarkraft ab, aber man kann doch rein qualitativ verstehen, warum die Kerne nicht kontinuierlich, sondern relativ abrupt von einer kugelförmigen in eine deformierte Gestalt übergehen.

In engem Zusammenhang damit steht bei diesen Kernen das Auftreten eines tiefliegenden 2^+-Niveaus. Die in unmittelbarer Nähe abgeschlossener Schalen noch kugelsymmetrischen Kerne können nämlich relativ leicht durch eine äußere Störung zu Deformationsschwingungen um ihre Gleichgewichtslage angeregt werden, da die rücktreibende Kraft als Differenz des Paarungs- und Deformationseffektes klein ist. Der Kern wird sich also mit niedriger Frequenz aus seiner Kugelgestalt in eine

Ellipse verformen, wieder zur Kugel werden usf. Eine solche Schwingung ist eine Quadrupolschwingung (2^+-Niveau).

Die Diagonalisation einer Paarwechselwirkung kann nicht als Beitrag zu einem mittleren statischen bzw. um seine Gleichgewichtslage schwingenden Einteilchenpotential gedeutet werden, wie dies bei der Hartree-Fock- und der RPA-Methode der Fall war, sondern es handelt sich hier um einen vollkommen neuen Effekt, der der Supraleitung bei Metallen analog ist. Es wurde deshalb auch die zur Deutung der Supraleitung von Bardeen, Cooper und Schrieffer [BCS 57] entwickelte Theorie mit Erfolg von Belyaev [Be 59] auf den Kern angewendet. Während sich hierauf der letzte Teil dieses Kapitels bezieht, werden wir zunächst an einem sehr einfach zu überblickenden Modell [Mo 58], in welchem nur eine entartete j-Schale betrachtet wird, einige der oben erwähnten Effekte qualitativ zu verstehen versuchen.

2. *Konstruktion eines Ersatzhamiltonoperators*

Da nach dem in der Einleitung Gesagten für Paarungseffekte nur die nicht aufgefüllten Schalen eine wesentliche Rolle spielen, wollen wir ein Modell betrachten, in dem sich N Nukleonen in einer energetisch entarteten j-Schale befinden und durch Kontaktkräfte korreliert sind. Die Einteilchenenergien ε_ν^0 sollen dabei durch das selbstkonsistente Potential des Rumpfes gegeben sein, d. h., der Beitrag der Nukleonen der äußeren j-Schale zu ε_ν^0 wird vernachlässigt. Der Hamiltonoperator hat damit die Gestalt:

$$H^{(N)} = \sum_\nu \varepsilon_\nu^0 a_\nu^\dagger a_\nu + \frac{1}{4} \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} \langle \mu' \nu' | \bar{v} | \mu \nu \rangle a_{\mu'}^\dagger a_{\nu'}^\dagger a_\nu a_\mu , \qquad \text{(VII. 1)}$$

$$\nu = \{\alpha j m\}; \qquad \alpha = \{n l \vartheta_3\}.$$

Da wir uns nur in einer j-Schale befinden, läßt sich die Wechselwirkung V schreiben als:

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\substack{m_1' m_2' \\ m_1 m_2}} {}_{\text{a.s.}}\langle \alpha j m_1' \, \alpha j m_2' | v | \alpha j m_1 \, \alpha j m_2 \rangle_{\text{a.s.}} \, a_{m_1'}^\dagger a_{m_2'}^\dagger a_{m_2} a_{m_1} . \qquad \text{(VII. 2)}$$

Das Matrixelement von v ist dabei zwischen antisymmetrischen Zwei-Teilchenzuständen genommen, worauf die Buchstaben a.s. hindeuten sollen. Setzt man für diese Zustände ihre inverse Clebsch-Gordan-Entwicklung ein, so lautet (VII. 2):

$$V=\tfrac{1}{4}\sum_{\substack{m_1'm_2'\\m_1m_2}}\sum_{\substack{II'\\MM'}} c(jjI';m_1'm_2'M')c(jjI;m_1m_2M)$$
$$\times\langle\alpha jjI'M'|v|\alpha jjIM\rangle a^\dagger_{m_1'}a^\dagger_{m_2'}a_{m_2}a_{m_1}. \qquad \text{(VII.3)}$$

Wir wollen nur im folgenden sehen, inwieweit eine δ-Kraft einer reinen Paarwechselwirkung äquivalent ist. Mit

$$v=v_0\,\delta(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|),\quad v_0<0 \qquad \text{(VII.4)}$$

müssen wir folgendes Matrixelement auswerten:

$$M_\delta\equiv\langle nljjI'M'|\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)|nljjIM\rangle. \qquad \text{(VII.5)}$$

Entwickeln wir die δ-Funktion nach Legendre-Polynomen

$$\delta(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)=\frac{\delta(r_1-r_2)}{r_1r_2}\sum_k\frac{2k+1}{2\pi}P_k(\cos\Theta_{12}) \qquad \text{(VII.6)}$$

und spalten die Radialanteile der Wellenfunktion ab

$$|nljjIM\rangle=R^2_{nl}\sum_{m_1m_2}c(jjI;m_1m_2M)|jm_1jm_2\rangle=R^2_{nl}|jjIM\rangle, \qquad \text{(VII.7)}$$

so ergibt sich für M_δ:

$$M_\delta=\sum_k f_k(jjII'MM')F_k(nl),$$

$$f_k=(2k+1)\langle jjI'M'|P_k(\cos\Theta_{12})|jjIM\rangle, \qquad \text{(VII.8)}$$

$$F_{k=0}=\int_0^\infty r^2R^4_{nl}(r)\,\mathrm{d}r.$$

Die vollständige Auswertung von $\sum_k f_k$ liefert unter Benutzung von „Racah-Algebra" (vgl. Racah [Ra 42], de Shalit [Sh 53]):

$$M_\delta(I)=F_0(2j+1)C^2(jjI;\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}0)\,\delta_{II'}\delta_{MM'}. \qquad \text{(VII.9)}$$

Es ist zu bemerken, daß in (VII.5) I und I' nur gerade sein können, da nur solche Werte total antisymmetrisierten Zweiteilchenzuständen entsprechen (siehe auch Kapitel I). Wir erhalten somit für (VII.3):

$$V=\sum_{IM}M_\delta(I)A_{IM}A^\dagger_{IM}=M_\delta(0)A_{00}A^\dagger_{00}+\sum_{I=2}^{2j-1}\sum_M M_\delta(I)A_{IM}A^\dagger_{IM}, \qquad \text{(VII.10a)}$$

$$A_{IM}=\sum_{m_1m_2}c(jjI;m_1m_2M)a^\dagger_{m_1}a^\dagger_{m_2}. \qquad \text{(VII.10b)}$$

Wertet man (VII.9) aus, so folgt für die einzelnen Drehimpulsanteile $M_\delta(I)$ (z. B. für $j=\frac{7}{2}$):

$M_\delta(I)$	$8F_0$	$1{,}9F_0$	$0{,}94F_0$	$0{,}46F_0$
I	0	2	4	6

Wir können deshalb alle Terme mit $I \neq 0$ in guter Näherung vernachlässigen und werden so zu dem gesuchten Paarhamiltonoperator gelangen. Um seine gewöhnliche Form angeben zu können, müssen wir von den sonst üblichen Condon-Shortley-Phasen ([CS 59], S. 48) zu den sogenannten BCS-Phasen (siehe z. B. Nilsson, Prior [NP 61]) übergehen. Die Phasenwahl nach Condon-Shortley lautet (für die Beziehungen (VII. 11) soll $m>0$ gelten):

$$K|jm\rangle_{\text{C.S.}} = (-1)^{j-m}|j-m\rangle_{\text{C.S.}}. \qquad \text{(VII. 11a)}$$

(K ist der Zeitspiegelungsoperator, siehe z. B. Messiah [Me 61], S. 664ff.).

Sie liefert die bekannten Clebsch-Gordon-Phasen, und ein spezieller Clebsch-Gordan-Koeffizient ist dabei z. B. gegeben durch:

$$c(jj0;m-m0) = \frac{(-1)^{j-m}}{(2j+1)^{1/2}}. \qquad \text{(VII. 11b)}$$

Die BCS-Phasen sind durch folgende Beziehungen festgelegt:

$$|jm\rangle_{\text{BCS}} = |jm\rangle_{\text{C.S.}}, \qquad \text{(VII. 11c)}$$

$$|j-m\rangle_{\text{BCS}} = (-)^{j-m+l}|j-m\rangle_{\text{C.S.}}. \qquad \text{(VII. 11d)}$$

Dies bedeutet:

$$|j-m\rangle_{\text{BCS}} = K|jm\rangle_{\text{BCS}}, \qquad \text{(VII. 11e)}$$

$$K|j-m\rangle_{\text{BCS}} = -|jm\rangle_{\text{BCS}}. \qquad \text{(VII. 11f)}$$

Durch diese Konvention wird der Faktor $(-1)^{j-m}$ in (VII. 11b) auf den Zustand $|j-m\rangle$ gewälzt, und der Ersatzhamiltonoperator V^{P} für reine Paarwechselwirkungen hat die Form:

$$V^{\text{P}} = -|G| \sum_{m,m'>0}^{\Omega=j+1/2} a_{m'}^{\dagger} a_{-m'}^{\dagger} a_{-m} a_m. \qquad \text{(VII. 12)}$$

3. *Das Seniority-Modell*

Das Zweiteilchensystem. In der betrachteten j-Schale mit ihren 2Ω entarteten Zuständen mögen sich zunächst $N=2$ Teilchen befinden

(vgl. z. B. Po^{210}). In dieser Zweiteilchen-(jj)-Konfiguration hat V^P, und wenn wir in (VII.1) $\varepsilon_\nu^0 = 0$ setzen (durch geeignete Verschiebung des Energienullpunkts) auch $H^{(N=2)}$, folgende Gestalt:

$$V^P = -|G| \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \ldots 1 & 0 \ldots \\ 1 & 1 & 1 \ldots 1 & 0 \ldots \\ 1 & 1 & 1 \ldots 1 & 0 \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots \quad \vdots & \\ 1 & 1 & 1 \ldots 1 & 0 \ldots \\ 0 & 0 & 0 \quad 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots \quad \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \tag{VII.13}$$

Die einzelnen Matrixelemente sind dabei gegeben durch:

$$\langle m_1 m_1' | V^P | m_2 m_2' \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für } m_1' = -m_1 \text{ und } m_2' = -m_2, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{VII.14}$$

Die Dimension des nichtverschwindenden Teils von (VII.13) ist durch die Zahl Ω derjenigen Zustände gegeben, die man erhält, wenn man zwei Teilchen in einer j-Schale auf alle möglichen Weisen anordnet. Ein normierter Eigenzustand von (VII.13) hat, wie man leicht sieht, die Form:

$$\psi^{N=2} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{VII.15}$$

Mit

$$V^P \psi^{N=2} = -|G| \Omega \psi^{N=2} \tag{VII.16}$$

folgt, daß der zum Zustand $\psi^{N=2}$ gehörende Eigenwert gleich der Spur von (VII.13) ist und deshalb alle anderen Zustände, die zu $\psi^{N=2}$ orthogonal sind, zum Eigenwert Null entartet sein müssen (V^P ist negativ semidefinit). Da der Paarhamiltonoperator per definitionem nur zwischen zwei zu $I=0$ gekoppelten Nukleonen wirkt, wird allein dieser Zustand um $|G|\Omega$ abgesenkt, während alle anderen Zustände höherer Drehimpulse unbeeinflußt bleiben. In Fig. 37a ist dieser Sachverhalt qualitativ aufgezeichnet.

Die Entartung der Zustände mit $I \neq 0$ in Fig. 37a rührt daher, daß wir bei der Ableitung der Paarwechselwirkung die Terme $M_\delta(I)$ für $I>0$ vernachlässigten. Ihre Berücksichtigung würde zu einer kleinen Aufspaltung der entarteten Niveaus führen, wie es z. B. beim experimentellen Spektrum von Po^{210} der Fall ist (Fig. 37b). Die Energielücke wird also in diesem einfachen Modell dadurch erklärt, daß von den im Schalenmodell miteinander entarteten $(N=2)$-Grundzuständen durch eine kurzreichweitige Wechselwirkung nur der zu $I=0$ gekoppelte $(N=2)$-Zustand wesentlich abgesenkt wird.

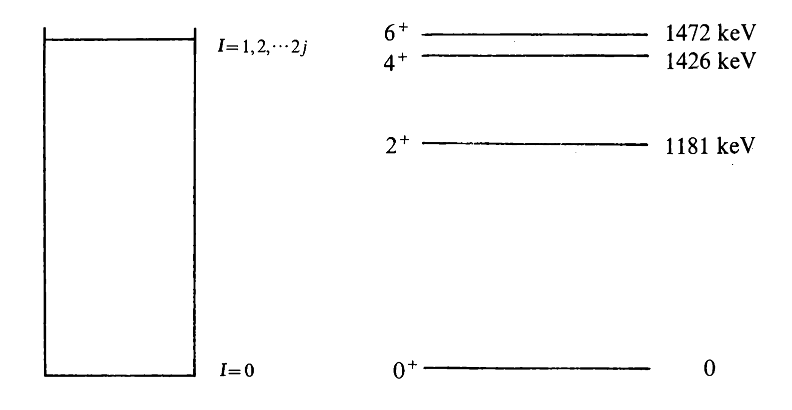


Fig. 37a Zweiteilchenspektrum einer reinen Paarkraft.

Fig. 37b Spektrum von Po^{210} ($=Pb^{208}+2p$ in der 1 h $\frac{9}{2}$-Schale). (Nach Newby, Konopinski [NK 59].)

Das N-Teilchensystem. Die Eigenzustände von V lassen sich besonders einfach durch den Paarerzeugungsoperator A ausdrücken (vgl. VII.10b):

$$A=\sum_{m>0}^{j} a_m^\dagger a_{-m}^\dagger. \qquad \text{(VII.17)}$$

$|\psi^{N=2}\rangle$ läßt sich damit bis auf Normierung schreiben in der Form:

$$|\psi^{N=2}\rangle \sim A|0\rangle_0. \qquad \text{(VII.18)}$$

Mit dem Teilchenzahloperator

$$\hat{N}=\sum_{m=-j}^{j} a_m^\dagger a_m \qquad \text{(VII.19)}$$

lassen sich einige nützliche Relationen angeben:

$$[V^P,A] = -|G|(\Omega+2-\hat{N})A, \qquad \text{(VII.20a)}$$

$$[A,\hat{N}] = -2A, \qquad \text{(VII.20b)}$$

$$\begin{aligned}[V^P,A^f] &= [V^P,A]A^{f-1}+A[V^P,A]A^{f-2}+\cdots+A^{f-1}[V^P,A]\\ &= -|G|[f(\Omega+2-\hat{N})+f(f-1)]A^f.\end{aligned} \qquad \text{(VII.20c)}$$

Die Beziehungen (VII.20) sind durch einfaches Auskommutieren und Anwenden der Fermivertauschungsrelationen der a und $a^\dagger$ nachzuprüfen.

Die Dimension der gesamten Wechselwirkungsmatrix ist gegeben durch die Zahl der Möglichkeiten, aus $2\Omega=2j+1$ *Einteilchenzuständen* einen *N-Teilchenzustand* aufzubauen:

$$t_N=\binom{2\Omega}{N}. \qquad \text{(VII.21a)}$$

Wie schon erwähnt, hat der reine Paaranteil der Gesamtmatrix die Dimension

$$t'_N=\binom{\Omega}{N/2}. \qquad \text{(VII.21b)}$$

Die Spur $\mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}}$ der Wechselwirkungsmatrix berechnet sich wie folgt:

$$\mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}}=\sum_{\nu}\langle N\nu|V^{\mathrm{P}}|N\nu\rangle, \qquad \text{(VII.22a)}$$

wobei $|N\nu\rangle$ ein vollständiges System von *N-Teilchenzuständen* ist. Es ergibt sich:

$$\mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}}=-|G|\sum_{m>0}^{j}\sum_{\nu}\langle N\nu|a^{\dagger}_{-m}a^{\dagger}_{m}a_m a_{-m}|N\nu\rangle. \qquad \text{(VII.22b)}$$

Damit das Matrixelement von Null verschieden ist, muß $|N\nu\rangle$ die Quantenzahlen m und $-m$ enthalten. Von solchen Zuständen gibt es gerade $\binom{2\Omega-2}{N-2}$ Stück, und man erhält:

$$\mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}}=-|G|\sum_{m>0}^{j}\binom{2\Omega-2}{N-2}=-|G|\,\Omega\,\frac{(2\Omega-2)!}{(2\Omega-N)!(N-2)!}. \qquad \text{(VII.22c)}$$

Für zwei Teilchen in der betrachteten j-Schale folgt das alte Ergebnis. Mit $V^{\mathrm{P}}|0\rangle_0=0$ gilt nämlich:

$$\begin{aligned} V^{\mathrm{P}}A|0\rangle_0&=V^{\mathrm{P}}A|0\rangle_0-A\,V^{\mathrm{P}}|0\rangle_0=[V^{\mathrm{P}},A]|0\rangle_0\\ &=-|G|(\Omega+2-\hat{N})A|0\rangle_0=-|G|\,\Omega A|0\rangle. \end{aligned} \qquad \text{(VII.23)}$$

Wie bereits gezeigt, sind alle zu $A|0\rangle_0$ orthogonalen Zustände $B_i^{(2)}|0\rangle_0$ zum Eigenwert Null entartet:

$$V^{\mathrm{P}}B_i^{(2)}|0\rangle_0=0; \quad i=1,2,\ldots,t_2-1. \qquad \text{(VII.24)}$$

Befinden sich vier Teilchen in der j-Schale, so haben wir den Zustand $A^2|0\rangle_0$ zu betrachten. Wie im Fall zweier Teilchen folgt:

$$V^{\mathrm{P}}A^2|0\rangle_0=[V^{\mathrm{P}},A^2]|0\rangle_0=-2|G|(\Omega-1)A^2|0\rangle_0. \qquad \text{(VII.25)}$$

$A^2|0\rangle_0$ ist also Eigenzustand von V^{P} zum Eigenwert $-2|G|(\Omega-1)$. Weitere Eigenzustände sind gegeben durch:

$$V^{\mathrm{P}}AB_i^{(2)}|0\rangle_0=[V^{\mathrm{P}},A]B_i^{(2)}|0\rangle_0=-|G|(\Omega-2)AB_i^{(2)}|0\rangle_0. \qquad \text{(VII.26)}$$

Bilden wir jetzt die Summe der Eigenwerte, gewichtet mit dem Entartungsgrad, so sehen wir, daß diese gleich der nach (VII.22c) berechneten Spur $\mathrm{Sp}_4 V^{\mathrm{P}}$ ist:

$$-2|G|(\Omega-1)-(t_2-1)|G|(\Omega-2)=-|G|\,\Omega(2\Omega^2-5\Omega+3)=\mathrm{Sp}_4 V^{\mathrm{P}}. \tag{VII.27}$$

Damit ist das Spektrum für vier Teilchen durch die in (VII.25) und (VII.26) angegebenen Eigenwerte erschöpft, und die restlichen $t_4-(t_2-1)-1$ Zustände sind wieder zum Eigenwert Null entartet:

$$V^{\mathrm{P}} B_i^{(4)}|0\rangle_0=0; \quad i=1,2,\ldots,(t_4-t_2). \tag{VII.28}$$

Definition der seniority des Systems. Die Zahl s soll den Paarungszustand des Systems kennzeichnen:

$s=0$, der Zustand besteht nur aus Paaren,
$s=1$, ein Teilchen ist nicht gepaart (N ungerade),
$s=2$, zwei Teilchen sind nicht gepaart,
$s=3$, drei Teilchen sind nicht gepaart (N ungerade),
$\vdots \quad \vdots$
$s=N$, die Paarung ist aufgehoben.

Das *N*-Teilchenspektrum (*N* gerade). Wir wollen jetzt die Eigenwerte $E_s^{(N)}$ von V^{P} abhängig von der Teilchenzahl N und der seniority s aufschreiben. Dazu verallgemeinern wir (VII.26) und erhalten für einen N-Teilchenzustand $|sN\rangle$ mit der Paarungsquantenzahl s:

$$|sN\rangle=A^{\frac{N-s}{2}} B_i^{(s)}|0\rangle_0; \quad N\leq\Omega, \; s=0,2,4,\ldots,N \tag{VII.29}$$

und für die Zustände $s=N$, die zum Eigenwert Null entartet sind:

$$V^{\mathrm{P}} B_i^{(s)}|0\rangle=0. \tag{VII.30}$$

Mit (VII.20c) ergibt sich

$$V^{\mathrm{P}}|sN\rangle=\left[V^{\mathrm{P}},A^{\frac{N-s}{2}}\right]B_i^{(s)}|0\rangle_0 \tag{VII.31a}$$

$$=-|G|\left[\frac{N-s}{2}(\Omega+2-\hat{N})+\frac{N-s}{2}\left(\frac{N-s}{2}-1\right)\right]|sN\rangle,$$

d.h., die Eigenwerte haben die Gestalt:

$$E_s^{(N)}=-\frac{|G|}{4}(N-s)(2\Omega+2-N-s). \tag{VII.31b}$$

Wir haben noch zu beweisen, daß die durch (VII.29) gegebenen Zustände $|sN\rangle$ das vollständige Spektrum liefern, d. h., daß gilt:

$$\mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}} = \sum_{s=0}^{N}{}' D(s) E_s^{(N)}, \tag{VII.32}$$

wobei $D(s)$ der Entartungsgrad eines Eigenwerts mit seniority s ist, und der Strich an der Summe bedeutet, daß s nur gerade Werte durchläuft. Die Dimension der gesamten Wechselwirkungsmatrix ist bei N Teilchen gegeben durch

$$\sum_{s=0}^{N}{}' D(s) = t_N = \binom{2\Omega}{N} \tag{VII.33a}$$

und für $N-2$ Teilchen:

$$\sum_{s=0}^{N-2}{}' D(s) = t_{N-2}. \tag{VII.33b}$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen erhält man:

$$D(N) = t_N - t_{N-2}. \tag{VII.33c}$$

Setzt man (VII.33c) in (VII.32) ein, so ergibt sich:

$$\sum_{s=0}^{N}{}' D(s) E_s^{(N)} = \sum_{s=0}^{N}{}' (t_s - t_{s-2}) E_s^{(N)} = \sum_{s=0}^{N}{}' [t_s(E_s^{(N)} - E_{s+2}^{(N)})] + |G|(\Omega - N)$$
$$= -|G| \sum_{s=0}^{N-2}{}' t_s(\Omega - s). \tag{VII.34}$$

Mit (VII.32) und (VII.34) folgt sofort die Beziehung

$$-|G| t_N(\Omega - N) = \mathrm{Sp}_{N+2} V^{\mathrm{P}} - \mathrm{Sp}_N V^{\mathrm{P}}, \tag{VII.35}$$

deren Richtigkeit man leicht mit Hilfe von (VII.21a) und (VII.22c) beweist. Wenn also Gleichung (VII.34) für N richtig ist, so ist sie wegen (VII.35) auch für $N+2$ richtig: da (VII.34) aber für $N=2$ gleich $\mathrm{Sp}_2 V^{\mathrm{P}}$, gilt (VII.32) für alle N, q. e. d.

Das N-Teilchenspektrum (N ungerade). Betrachten wir einen Zustand mit $(N-1)/2$ Teilchenpaaren und einem unabgesättigten Teilchen, d. h. $s=1$, so kann dieser Zustand folgendermaßen geschrieben werden:

$$|s=1\,N\rangle = A^{\frac{N-1}{2}} a_{m_0}^{\dagger} |0\rangle_0. \tag{VII.36}$$

Sein Eigenwert zu V^{P} ist:

$$V^{\mathrm{P}}|s=1\,N\rangle = [V^{\mathrm{P}}, A^{\frac{N-1}{2}}] a_{m_0}^{\dagger}|0\rangle_0 = -\frac{|G|}{4}(N-1)(2\Omega - N + 1)|s=1\,N\rangle. \tag{VII.37}$$

Da m_0 genau 2Ω Werte annehmen kann $(-j \leq m_0 \leq j)$, ist der Grundzustand $E_1^{(N)}$ für N ungerade 2-fach entartet (im Gegensatz zu dem einfachen Grundzustand bei N gerade). Ein allgemeiner Zustand $|sN\rangle$ mit N ungerade ist wie im Fall N gerade gegeben durch:

$$|sN\rangle = A^{\frac{N-s}{2}} B_i^{(s)}|0\rangle_0; \quad N<\Omega, \; s=1,3,5,\ldots,N. \qquad \text{(VII.38)}$$

$E_s^{(N)}$ gibt also sowohl für gerade als auch für ungerade N das Spektrum wieder.

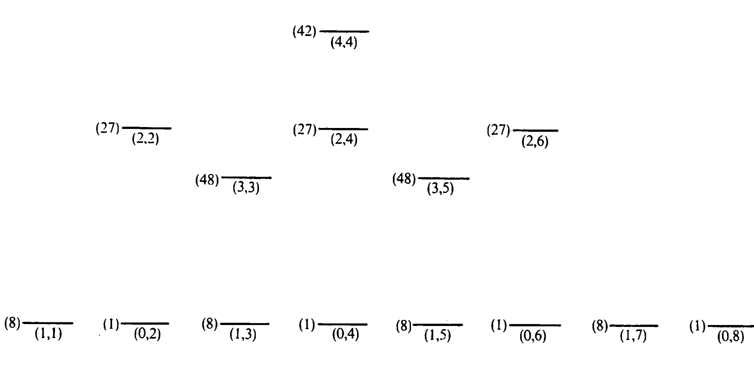


Fig. 38a Seniority-Spektrum für eine $(j=\frac{7}{2})$-Schale. Die Zahlen links von den Niveaus geben die Entartungsgrade an, die Zahlen darunter jeweils Seniority s und Teilchenzahl N.

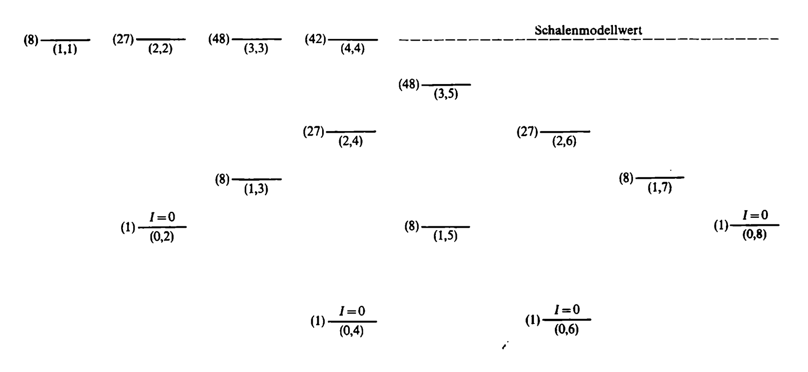


Fig. 38b Aufspaltung der entarteten $(\frac{7}{2})^N$-Konfiguration durch eine Paarwechselwirkung.

Ergebnisse des Seniority-Modells. Unsere bisherigen Überlegungen waren nur richtig für $N \leq \Omega$, da nur dann die Gleichungen (VII.32–33c) physikalisch sinnvoll sind ($D(s) > 0$!). Da jedoch

$$\binom{2\Omega}{N} = \binom{2\Omega}{2\Omega - N} = \binom{2\Omega}{N_L}, \tag{VII.39}$$

können wir für $N > \Omega$ alle unsere Überlegungen beibehalten, wenn wir sie anstatt auf die Zahl N der Teilchen auf die Zahl $N_L = 2\Omega - N$ der Löcher anwenden. Daraus ergibt sich, daß für $N > \Omega$ die Lochbeschreibungsweise der Teilchenbeschreibungsweise für $N < \Omega$ völlig äquivalent ist. Insbesondere haben eine bestimmte Anzahl Teilchen das gleiche Spektrum, wie dieselbe Anzahl von Löchern. In Fig. 38a und Fig. 38b sind zur Veranschaulichung für eine ($j = \frac{7}{2}$)-Schale die Seniority-Spektren für die Teilchenzahlen $N = 1$ bis 8 angegeben.

In Fig. 38a sind alle Grundzustände auf gleiche Energie gelegt, um die Äquivalenz von Teilchen und Löchern zu verdeutlichen. Fig. 38b ist so angeordnet, daß man die Aufspaltung der $\binom{2\Omega}{N}$-fach entarteten j-Schale durch die Paarkraft V^{P} erkennt. (Alle Schalenmodellgrundzustände wurden zum besseren Vergleich auf dieselbe Energie gesetzt.) Es ergibt sich qualitativ dasselbe Verhalten, wie bei den in Fig. 36 gezeigten Zinn-Spektren: Für alle Teilchenzahlen werden durch die Paarkraft gegenüber der Schalenmodellkonfiguration ein oder mehrere Zustände energetisch abgesenkt; während jedoch die Grundzustände der N-ungerade-Konfigurationen mehrfach entartet sind, sind es diejenigen der N-gerade-Konfigurationen nicht. Werden diese Entartungen durch die im Ansatz einer reinen Paarkraft nichtberücksichtigten Terme aufgehoben, so fängt das Spektrum für ungerades N sofort über dem Grundzustand an, wogegen für gerades N die Energielücke von $|G|\Omega$ (s. (VII.31b)) zum nächsten Anregungszustand erhalten bleibt. (Die Anregungszustände sind dabei durch die seniority des Systems charakterisiert.)

Der Grundzustand ist gegenüber dem Schalenmodellwert auf Grund der Paarwechselwirkung für $N \ll \Omega$ um ungefähr (s. (VII.31b))

$$\Delta E \simeq -\frac{N}{2}|G|\Omega \tag{VII.40}$$

abgesenkt, d.h., jedes der $N/2$ Paare hat eine Bindungsenergie von etwa $-|G|\Omega$. Wird N vergleichbar mit Ω, so wird ΔE kleiner, da sich aufgrund des Pauliprinzips die Beschränkung der zur Verfügung stehenden Zustände bemerkbar macht.

Wie Fig. 38a zeigt, ist die Energiedifferenz bei geraden Kernen zwischen Grundzustand und den niedrigsten Anregungszuständen unabhängig von der Teilchenzahl in der betrachteten j-Schale gleich $|G|\Omega$. Da im Seniority-Modell nach (VII.33c) auch der Entartungsgrad $D(s)$ N-unabhängig ist, wird hier die experimentell beobachtete Tatsache reproduziert, daß die Termdichte für niedrig angeregte Zustände von der in der unaufgefüllten j-Schale vorhandenen Nukleonenzahl im wesentlichen unabhängig ist, wogegen im Schalenmodell der Entartungsgrad mit wachsendem N steigt.

In Kapitel II haben wir bemerkt, daß sich im Schalenmodell Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten als viel zu klein erweisen. Im Seniority-Modell ist der Quadrupolübergang von Grundzustand ($s=0$) zum ersten Anregungszustand ($s=2$) folgender Übergangsamplitude proportional:

$$|\langle s=2|\hat{Q}_{20}|s=0\rangle|^2; \quad \hat{Q}_{20}=\sum_{m=-j}^{j} q_m a_m^\dagger a_m; \qquad \text{(VII.41)}$$
$$q_m=\langle jm|r^2(3\cos^2\Theta-1)|jm\rangle.$$

Da $\hat{Q}_{20}$ als Einteilchenoperator höchstens ein Paar aufbrechen kann, gilt ($\langle s=0|\hat{Q}_{20}|s=0\rangle=0$ für einen im Grundzustand kugelförmigen Kern):

$$\sum_{\lambda}|\langle s=2,\lambda|\hat{Q}_{20}|s=0\rangle|^2=\sum_{s'\lambda}\langle s=0|\hat{Q}_{20}|s'\lambda\rangle\langle s'\lambda|\hat{Q}_{20}|s=0\rangle$$
$$=\langle s=0|\hat{Q}_{20}^2|s=0\rangle. \qquad \text{(VII.42)}$$

Beachtet man, daß

$$|s=0\rangle=\text{const}\cdot A^{N/2}|0\rangle_0, \qquad \text{(VII.43)}$$

so folgt aus (VII.42) unter Benutzung der im Anhang I angegebenen Rechenregeln für die Auswertung von Matrixelementen:

$$|\langle s=2|\hat{Q}_{20}|s=0\rangle|^2=\frac{\frac{N}{2}\left(\Omega-\frac{N}{2}\right)}{\Omega-1}\left(\frac{2}{\Omega}\sum_{m=-j}^{j}q_m^2\right). \qquad \text{(VII.44)}$$

Man sieht daraus, daß sich selbst in diesem einfachen Modell für $N\ll\Omega$ der gewünschte Kollektiveffekt zeigt: Die Quadrupolübergangswahrscheinlichkeit ist proportional $N/2$, der Zahl der im ($s=0$)-Zustand vorhandenen Paare.

4. BCS-Ansatz und Variationsverfahren

Variationssatz. Die Anwendbarkeit des Seniority-Modells ist nicht auf j^N-Konfigurationen beschränkt. Existieren oberhalb abgeschlossener Schalen mehrere j-Schalen, die im Schalenmodell fast entartet sind, so läßt sich der Konfigurationsraum leicht hierauf erweitern. Weit entfernt von abgeschlossenen Schalen wird jedoch durch das Auftreten einer stabilen Gleichgewichtsdeformation die Entartung so stark aufgehoben (s. Kap. III), daß das Modell völlig versagt.

Anhand der Ergebnisse des Seniority-Modells kann man jedoch annehmen, daß auch in diesen Massenbereichen die Paarungseffekte eine wichtige Rolle spielen, und wir werden deshalb eine wesentlich allgemeinere Methode angeben, die es erlaubt, die A Nukleonen des Gesamtkerns in Betracht zu ziehen. Analog dem von Bardeen, Cooper und Schrieffer [BCS 57] angegebenen Variationsverfahren zur Bestimmung des Grundzustandes eines Supraleiters werden wir versuchen, den Grundzustand eines Kerns aus einer Klasse von Zuständen zu ermitteln, die aus reinen Paarkonfigurationen aufgebaut sind,

$$|BCS\rangle = \prod_{k>0}^{\infty} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger)|0\rangle_0, \qquad \text{(VII.45)}$$

wobei nach den Parametern u_k, v_k variiert wird.

k soll hierbei für den Satz aller Quantenzahlen stehen, die einen Einteilchenzustand eindeutig charakterisieren, und $|-k\rangle$ ist der zu $|k\rangle$ zeitgespiegelte Zustand

$$|-k\rangle \equiv K|k\rangle, \quad k>0, \qquad \text{(VII.46)}$$

was insbesondere bedeutet, daß die z-Komponenten m des Drehimpulses j dieser Zustände einander entgegengesetzt gleich sind. $k>0$ soll dabei stets $m>0$ bedeuten. Damit $|BCS\rangle$ normiert ist, muß weiter gelten:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \qquad \text{(VII.47)}$$

v_k^2 bzw. u_k^2 geben die Wahrscheinlichkeiten an, ein bestimmtes Paar im Zustand $(k, -k)$ besetzt bzw. nicht besetzt zu haben. Ein Nachteil dieses Variationsansatzes, den man der Einfachheit halber in Kauf nimmt, ist dadurch gegeben, daß $|BCS\rangle$ bezüglich der Teilchenzahl unscharf ist. Im Festkörper ist dies wegen $N \simeq 10^{23}$ von geringer Bedeutung (siehe Abschnitt 10). Im Kern führt die Verletzung der Teilchenzahlinvarianz an einigen Stellen zu Fehlern, die man durch verfeinerte Methoden beseitigen kann (PBCS, FBCS; siehe Kapitel X). Das Produkt in (VII.45) kann man auch in folgender Weise schreiben:

$$|\mathrm{BCS}\rangle = a_0|N=0\rangle + a_2|N=2\rangle + a_4|N=4\rangle + \cdots. \qquad \text{(VII.48)}$$

$|\mathrm{BCS}\rangle$ enthält also nur Komponenten mit geraden Teilchenzahlen und kann so zunächst nur zur Beschreibung von gg-Kernen verwendet werden. Man überzeugt sich leicht, daß man $|\mathrm{BCS}\rangle$ durch einen Operator A' ausdrücken kann

$$|\mathrm{BCS}\rangle \sim e^{A'}|0\rangle_0 = \sum_\nu \frac{1}{\nu!} A'^\nu \qquad \text{(VII.49)}$$

$$A' = \sum_k \frac{v_k}{u_k} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger, \qquad \text{(VII.50)}$$

der offenbar einer Verallgemeinerung des Paarerzeugungsoperators aus Gleichung (VII. 17) entspricht[1].

Wahl der Lagrangefunktion. Der allgemeine Hamiltonoperator mit Paarwechselwirkung lautet:

$$H = \sum_k \varepsilon_k^0 a_k^\dagger a_k + \sum_{kk'>0} \langle k-k|v|k'-k'\rangle a_k^\dagger a_{-k}^\dagger a_{-k'} a_{k'}. \qquad \text{(VII.51)}$$

Die Diagonalelemente der Wechselwirkung (das Hartree-Fock-Potential) wurden dabei zur kinetischen Energie geschlagen und die Außerdiagonalglieder durch eine reine Paarwechselwirkung approximiert. Im Hinblick auf den entarteten Fall des Seniority-Modells oder die am Anfang dieses Abschnitts erwähnte Erweiterung auf mehrere in einem Energieintervall liegende unaufgefüllte j-Schalen können wir das Matrixelement $\langle k-k|v|k'-k'\rangle$ durch einen mittleren Wert $-|G|$ ersetzen und erhalten für den Hamiltonoperator (VII.51):

$$H = \sum_k \varepsilon_k^0 a_k^\dagger a_k - |G| \sum_{k,k'>0} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger a_{-k'} a_{k'}. \qquad \text{(VII.52)}$$

Diese Form wird als Paarhamiltonoperator bezeichnet.

Die Parameter u und v in dem Variationsansatz (VII.45) müssen so bestimmt werden, daß der Erwartungswert von N den richtigen Wert

[1] Der Ansatz (VII.45) ist ein mathematisch einfach zu behandelnder Spezialfall eines allgemeinen Paaransatzes

$$|\Psi\rangle = \sum_N \sum_{k_1\ldots k_N} g_{k_1\ldots k_N} (a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger)(a_{k_3}^\dagger a_{k_4}^\dagger)\ldots(a_{k_{N-1}}^\dagger a_{k_N}^\dagger)|0\rangle,$$

in dem die Zustände jeweils paarweise besetzt bzw. unbesetzt sind. Ein solcher Ansatz hat wegen der Fermivertauschungsrelationen die erwünschte Eigenschaft, daß alle Zweiteilchenmatrixelemente mit demselben Vorzeichen zum Grundzustandserwartungswert des Hamiltonoperators beitragen.
Aus (VII.49) und (VII.50) folgt, daß (VII.45) der Annahme von sich unabhängig voneinander bewegenden Paaren entspricht.

bekommt. Dies läßt sich erreichen, indem man nicht $\langle \mathrm{BCS}|H|\mathrm{BCS}\rangle$, sondern $\langle \mathrm{BCS}|H'|\mathrm{BCS}\rangle$ variiert mit:

$$H' = H - \lambda \hat{N}. \qquad \text{(VII.53)}$$

Für den Erwartungswert des Teilchenzahloperators ergibt sich mit (VII.19) und (VII.45):

$$\langle \mathrm{BCS}|\hat{N}|\mathrm{BCS}\rangle \equiv \langle \hat{N}\rangle = 2\sum_{k>0} v_k^2. \qquad \text{(VII.54)}$$

Der Lagrangeparameter λ wird so festgelegt, daß

$$\langle \hat{N}\rangle = N. \qquad \text{(VII.55)}$$

Er hat die anschauliche Bedeutung der Energie, um die die Gesamtenergie des Systems vergrößert wird, wenn man ein Teilchen hinzufügt, und ist somit gleich dem chemischen Potential bzw. der Fermienergie. Die Teilchenunschärfe von $|\mathrm{BCS}\rangle$ berechnet sich zu:

$$(\Delta N)^2 = \langle \hat{N}^2\rangle - \langle \hat{N}\rangle^2 = 4\sum_{k>0} u_k^2 v_k^2. \qquad \text{(VII.56)}$$

Vergleich des BCS-Verfahrens mit dem Seniority-Modell. Für diesen Fall zeigt ein Vergleich der beiden Paarerzeugungsoperatoren (VII.17) und (VII.50) sofort, daß alle v_m gleich sein müssen. Mit (VII.54) und (VII.47) ergibt sich deshalb:

$$v_m = \sqrt{\frac{N}{2\Omega}}, \qquad u_m = \sqrt{1 - \frac{N}{2\Omega}}. \qquad \text{(VII.57)}$$

Berechnet man nun den BCS-Erwartungswert des Paarhamiltonoperators für den entarteten Fall

$$\langle \mathrm{BCS}|V^{\mathrm{P}}|\mathrm{BCS}\rangle = -|G|\Big[\sum_{m>0} u_m v_m\Big]^2 - |G|\sum_{m>0} v_m^4, \qquad \text{(VII.58)}$$

so erhält man für die Grundzustandsenergie:

$$^{\mathrm{BCS}}E_0^{(N)} = -|G|\,\frac{N}{4}\left(2\Omega - N + \frac{N}{\Omega}\right). \qquad \text{(VII.59)}$$

Ein Vergleich mit (VII.31b) zeigt Übereinstimmung bis auf Größen der Ordnung $1/\Omega$. Dieser Unterschied rührt von dem Term v_m^4 in Gleichung (VII.58) her, der deshalb für große Ω vernachlässigt werden kann. Die Streuung der Teilchenzahl ist gegeben durch:

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{2 - \frac{N}{\Omega}}. \qquad \text{(VII.60)}$$

Das Variationsverfahren. Aus (VII.52) und (VII.53) folgt für H':

$$H' = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k - |G| \sum_{kk'} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger a_{-k'} a_{k'}, \qquad \text{(VII.61a)}$$

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 - \lambda. \qquad \text{(VII.61b)}$$

Die Ankoppelung der Teilchenzahl entspricht also der Tatsache, daß wir die Einteilchenenergien von der Fermikante aus zu zählen haben. Mit (VII.54) und (VII.58) ergibt sich für den BCS-Erwartungswert von H':

$$\langle H' \rangle = 2 \sum_{k>0} \varepsilon_k v_k^2 - |G| \left[\sum_{k>0} u_k v_k \right]^2. \qquad \text{(VII.62)}$$

(Der Term $-|G| \sum_{k>0} v_k^4$ entspricht der Größe $\Gamma_{kk'}^{\mathrm{BCS}}$ in (VII.89) und wird deshalb der Einteilchenenergie ε_k zugeschlagen).
Variieren wir diesen Erwartungswert

$$\delta \langle H' \rangle = 0, \qquad \text{(VII.63a)}$$

so erhalten wir das Gleichungssystem:

$$\frac{\partial}{\partial v_k} \langle H' \rangle - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \langle H' \rangle = 0. \qquad \text{(VII.63b)}$$

Oder nach Ausführen der Differentiationen:

$$(v_k^2 - u_k^2)\, |G| \sum_{k>0} u_k v_k + 2 \varepsilon_k u_k v_k = 0. \qquad \text{(VII.64)}$$

Unter Einführung der Größe

$$\Delta = |G| \sum_{k>0} u_k v_k \qquad \text{(VII.65)}$$

kann man (VII.64) unter Berücksichtigung der Tatsache, daß für $G = \Delta = 0$, $v_k^2 = 1$ für besetzte, $u_k^2 = 0$ für unbesetzte Ninveaus sein muß, und unter Benutzung von (VII.47) nach v_k bzw. u_k auflösen:

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right), \qquad \text{(VII.66a)}$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right). \qquad \text{(VII.66b)}$$

Setzt man die Gleichungen (VII.66) in (VII.65) ein, so ergibt sich die sogenannte „Gap-Gleichung":

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{k>0} \frac{|G|}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \Delta . \tag{VII.67}$$

Im entarteten Modell erhält man mit (VII.57) und (VII.65) für Δ im Fall $N = \Omega$ sofort:

$$\Delta_{\text{e.M.}} = |G| \sum_{m>0}^{j} \left(\frac{N}{2\Omega}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{N}{2\Omega}\right)^{1/2} = \frac{1}{2} |G| \Omega \quad \text{für} \quad N = \Omega. \tag{VII.68}$$

Die hierdurch angezeigte physikalische Bedeutung von Δ als Energielücke wird im folgenden noch klarer zutagetreten.

5. *Bogolyubov-Transformation und Hartree-Fock-Bogolyubov-(HFB)-Gleichungen*

Bevor wir die obigen Gleichungen weiter diskutieren, wollen wir sie mit Hilfe einer anderen Methode herleiten, die auf einer von Bogolyubov [Bo 59] angegebenen kanonischen Transformation der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beruht (siehe auch Belyaev [Be 59]).

Transformation auf Quasiteilchenoperatoren. Betrachten wir den Kern in Hartree-Fock-Näherung, so lassen sich auf folgende Weise neue Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definieren:

$$\alpha_k = \begin{cases} a_k, & \text{für } k \text{ unbesetzt,} \\ -a_{-k}^\dagger, & \text{für } k \text{ besetzt,} \end{cases} \tag{VII.69a}$$

$$\alpha_k^\dagger = \begin{cases} a_k^\dagger, & \text{für } k \text{ unbesetzt,} \\ -a_{-k}, & \text{für } k \text{ besetzt.} \end{cases} \tag{VII.69b}$$

Die $\alpha_k^\dagger$ und α_k werden als Quasiteilchenoperatoren bezeichnet und es gilt

$$\alpha_k |\text{HF}\rangle = 0, \quad \text{für alle } k, \tag{VII.70}$$

d.h. der Hartree-Fock-Grundzustand ist in diesem Bild das Vakuum der Quasiteilchen.

Wie wir schon früher diskutiert haben, wird durch eine Wechselwirkung und speziell auch durch die Paarwechselwirkung die Fermikante „aufgeweicht", d.h. diese Wechselwirkung streut Paare von Teilchen mit entgegengesetztem Drehimpuls aneinander, und da unterhalb

der Fermikante aufgrund des Pauliprinzips alle Zustände verboten sind, können die Teilchen nur in Zustände oberhalb der Fermikante gestreut werden. Die Einteilchenzustände wenig unterhalb der Fermikante sind deshalb nicht mehr voll besetzt, wogegen jetzt auch Teilchen oberhalb der Fermikante mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit vorhanden sind. Will man die Definitionen der Quasiteilchenoperatoren aus den Gleichungen (VII.69) auf diesen neuen Sachverhalt übertragen, so besteht die natürliche Erweiterung darin, daß die α und $\alpha^\dagger$ jetzt Linearkombinationen aus den a und $a^\dagger$ sind, und es folgt:

$$\alpha_k = u_k a_k - v_k a^\dagger_{-k}, \tag{VII.71a}$$

$$\alpha^\dagger_k = u_k a^\dagger_k - v_k a_{-k} \tag{VII.71b}$$

(u_k und v_k seien reell gewählt).

Im Hartree-Fock-Fall haben v_k und u_k die Werte 1 und 0 für besetzte und die Werte 0 und 1 für unbesetzte Zustände. Man sieht sofort, daß hierfür die Gleichungen (VII.71) in die alten Beziehungen (VII.69) übergehen.

Die Quasiteilchenoperatoren erfüllen unter gewissen Nebenbedingungen weiter die Fermivertauschungsrelationen und stellen somit eine kanonische Transformation dar, d.h.

$$\{\alpha_k, \alpha^\dagger_{k'}\} = \delta_{kk'}, \text{ für } u_k^2 + v_k^2 = 1 \tag{VII.72}$$

und mit

$$\alpha_{-k} = u_{-k} a_{-k} - v_{-k} a^\dagger_k \tag{VII.73}$$

folgt für die übrigen Vertauschungsrelationen:

$$\{\alpha_k, \alpha_{-k}\} = \{\alpha^\dagger_k, \alpha^\dagger_{-k}\} = 0 \text{ für } \frac{u_k}{v_k} = -\frac{u_{-k}}{v_{-k}}. \tag{VII.74}$$

Die Nebenbedingung in (VII.74) ergibt eine Beziehung zwischen u_k und u_{-k} bzw. v_k und v_{-k} und es ist üblich, die von Belyaev benutzte Konvention zu wählen [Be 59]:

$$v_{-k} = -v_k; \qquad u_{-k} = u_k. \tag{VII.75}$$

Gleichung (VII.73) schreibt sich somit:

$$\alpha_{-k} = u_k a_{-k} + v_k a^\dagger_k. \tag{VII.76}$$

Wendet man einen Quasiteilchenvernichtungsoperator auf den BCS-Grundzustand (VII.45) an, so sieht man, daß

$$\alpha_k |\text{BCS}\rangle = \alpha_{-k} |\text{BCS}\rangle = 0 \tag{VII.77}$$

gilt, d.h., $|BCS\rangle$ ist das neue Quasiteilchenvakuum. Die zu (VII.71a, b) inverse Transformation lautet:

$$a_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha^\dagger_{-k}; \qquad a_{-k} = u_k \alpha_{-k} - v_k \alpha^\dagger_k. \tag{VII.78}$$

HFB-Gleichungen. Wir werden nun die Transformation (VII.78) in den allgemeinen Hamiltonoperator

$$H = \sum_{kk'} \langle k|t|k'\rangle a^\dagger_k a_{k'} + \tfrac{1}{4} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \langle k_1 k_2|\bar{v}|k_3 k_4\rangle a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} a_{k_4} a_{k_3} \tag{VII.79}$$

einsetzen, d.h. den Hamiltonoperator auf die Quasiteilchendarstellung umschreiben. Da – wie schon gesagt – die Quasiteilchenoperatoren schon gewisse Korrelationen der echten Teilchen berücksichtigen, werden wir hoffen, durch diese Transformation einen Teil der Restwechselwirkung diagonalisieren zu können. Wir erhalten somit unter Benutzung des im Anhang I angegebenen Wickschen Theorems, wenn wir die Einteilchenenergien wieder von der Fermikante aus zählen,

$$H' = U + H_{11} + H_{20} + H_4, \tag{VII.80}$$

wobei die einzelnen Terme folgende Form haben:

$$\begin{aligned} U = \sum_{k>0} [\langle k|t|k\rangle - \lambda \\ + \tfrac{1}{2} \sum_{k_1>0} (\langle k-k_1|\bar{v}|k-k_1\rangle + \langle k k_1|\bar{v}|k k_1\rangle) v^2_{k_1}] 2 v^2_k \\ + \sum_{kk_1>0} \langle k-k|\bar{v}|k_1-k_1\rangle u_{k_1} v_{k_1} u_k v_k, \end{aligned} \tag{VII.81a}$$

$$\begin{aligned} H_{11} = \sum_{kk'>0} \{[\langle k|t|k'\rangle - \lambda \delta_{kk'} \\ + \sum_{k_1>0} (\langle k-k_1|\bar{v}|k'-k_1\rangle + \langle k k_1|\bar{v}|k' k_1\rangle) v^2_{k_1}] (u_k u_{k'} - v_k v_{k'}) \\ - \sum_{k_1>0} \langle k-k'|\bar{v}|k_1-k_1\rangle u_{k_1} v_{k_1} (u_k v_{k'} + v_k u_{k'})\} (\alpha^\dagger_k \alpha_{k'} + \alpha^\dagger_{-k'} \alpha_{-k}), \end{aligned} \tag{VII.81b}$$

$$\begin{aligned} H_{20} = \sum_{kk'>0} \{[\langle k|t|k'\rangle - \lambda \delta_{kk'} \\ + \sum_{k_1>0} (\langle k-k_1|\bar{v}|k'-k_1\rangle + \langle k k_1|\bar{v}|k' k_1\rangle) v^2_{k_1}] (u_k v_{k'} + u_{k'} v_k) \\ + \sum_{k_1>0} \langle k-k'|\bar{v}|k_1-k_1\rangle u_{k_1} v_{k_1} (u_k u_{k'} - v_k v_{k'})\} (\alpha^\dagger_k \alpha^\dagger_{-k'} + \alpha_{-k} \alpha_{k'}). \end{aligned} \tag{VII.81c}$$

H_4 ist ein Beitrag mit vier Quasiteilchenoperatoren, der sich folgendermaßen in die verschiedenen Kombinationen aus Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aufteilt:

$$H_4 = H_{40} + H_{31} + H_{22}. \qquad \text{(VII.81d)}$$

(Die Beiträge $H_{40},\ldots,H_{22}$ sind dabei in bezug auf $\alpha^\dagger$ und α in analoger Weise definiert wie H_{11} und H_{20}.)

Damit der Hamiltonoperator (VII.80) mit den Quasiteilchenzahloperator vertauscht, ist H_{20} gleich Null zu setzen. Dies bedeutet, daß folgende Bedingungsgleichungen für u_k und v_k erfüllt sein müssen, die man auch als Hartree-Fock-Bogolyubov-Gleichungen bezeichnet:

$$\begin{aligned} h_{kk'} \equiv \{ & \langle k|t|k'\rangle - \lambda\delta_{kk'} \\ & + \sum_{k_1>0} (\langle k-k_1|\bar{v}|k'-k_1\rangle + \langle k k_1|\bar{v}|k' k_1\rangle) v_{k_1}^2 \} (u_k v_{k'} + u_{k'} v_k) \\ & + \sum_{k_1>0} \langle k-k'|\bar{v}|k_1-k_1\rangle u_{k_1} v_{k_1} (u_k u_{k'} - v_k v_{k'}) = 0. \end{aligned} \qquad \text{(VII.82)}$$

Man sieht sofort, daß für den Hartree-Fock-Fall

$$\begin{aligned} u_k = 0,\ v_k = 1,\ & \text{für } k \text{ besetzt}, \\ v_k = 0,\ u_k = 1,\ & \text{für } k \text{ unbesetzt}, \end{aligned} \qquad \text{(VII.83)}$$

die Bedingung (VII.82) in die Hartree-Fock-Gleichungen aus Kapitel V übergehen, d.h. diejenigen Quasiteilchen, die den Hartree-Fock-Grundzustand als Vakuum haben, bewegen sich unabhängig voneinander im Hartree-Fock-Einteilchenpotential:

$$\langle \bar{k}|t + \Gamma^{\mathrm{HF}}|\underline{k}'\rangle = 0, \qquad \text{(VII.84)}$$

$$\langle k|\Gamma^{\mathrm{HF}}|k'\rangle \equiv \sum_{\underline{k}_1 \gtrless 0} \langle k \underline{k}_1|\bar{v}|k' \underline{k}_1\rangle. \qquad \text{(VII.85)}$$

(Unterstrichene Indizes sollen hier wie früher nur Größen unterhalb der Fermikante darstellen.)

Die Konstante U in (VII.80) ist in diesem Fall die schon in Gleichung (V.34) angegebene Hartree-Fock-Grundzustandsenergie E_0^{HF}:

$$U = \sum_{\underline{k}_1 \gtrless 0} (t_{\underline{k}\underline{k}} + \tfrac{1}{2}\Gamma^{\mathrm{HF}}_{\underline{k}\underline{k}}) - \lambda N \qquad \text{(VII.86)}$$

Im allgemeinen entspricht die Lösung der HFB-Gleichungen einem Problem zur selbstkonsistenten Bestimmung sowohl von u_k, v_k als auch der Zustände $|k\rangle$, das bislang nur in wenigen Fällen in Angriff genommen wurde (siehe z.B. Faessler [Fa 67], Mang et al. [DMP 66]).

Die Gleichungen (VII.82) kann man kompakter schreiben, wenn man folgende Abkürzungen einführt:

$$\Gamma_{kk'}^{\mathrm{BCS}} \equiv \langle k|\Gamma^{\mathrm{BCS}}|k'\rangle = \sum_{k_1 \gtrless 0} \langle k k_1|\bar{v}|k' k_1\rangle v_{k_1}^2, \qquad \text{(VII.87)}$$

$$\Delta_{k-k'} \equiv \langle k|\Delta|-k'\rangle = -\sum_{k_1>0} \langle k-k'|\bar{v}|k_1 -k_1\rangle u_{k_1} v_{k_1}. \qquad \text{(VII.88)}$$

Γ^{BCS} ist offenbar eine natürliche Erweiterung des Hartree-Fock-Potentials Γ^{HF}, während Δ häufig als Paarpotential bezeichnet wird. Die durch (VII.87) gegebene Verallgemeinerung der Hartree-Fock-Einteilchenenergien lautet:

$$\varepsilon_{kk'} = t_{kk'} - \lambda\,\delta_{kk'} + \Gamma_{kk'}^{\mathrm{BCS}}. \qquad \text{(VII.89)}$$

Um den qualitativen Inhalt der HFB-Gleichungen zu veranschaulichen, wollen wir gewisse Annahmen über die Wechselwirkung machen. Beispielsweise gelten für eine reine Paarkraft folgende Auswahlregeln

$$\langle k-k'|\bar{v}|k_1 -k_1\rangle = 0, \quad \text{für } k \neq k' \qquad \text{(VII.90a)}$$

und somit für Δ:

$$\Delta_{k-k'} = \Delta_{k-k}\delta_{kk'} \equiv \Delta_k\,\delta_{kk'}. \qquad \text{(VII.90b)}$$

Die Matrix $h_{kk'}$ besitzt also in diesem Fall bezüglich Δ keine Außerdiagonalglieder mehr. Denkt man sich weiter eine Diagonalisation von $\varepsilon_{kk'}$ (Eigenwerte $\hat{\varepsilon}_k$) durchgeführt, so reduziert sich $h_{kk'}=0$ auf die Gleichung:

$$2\hat{\varepsilon}_k u_k v_k - \Delta_k(u_k^2 - v_k^2) = 0. \qquad \text{(VII.91)}$$

In Strenge ist dabei die Diagonalisation von $\varepsilon_{kk'}$ und die Lösung von (VII.91) selbstkonsistent durchzuführen; wir nehmen aber weiter an, daß die beiden Gleichungssysteme entkoppelt seien und $\hat{\varepsilon}_k$ z.B. dem Nilsson-Modell entnommen werden kann.

Aus Gleichung (VII.91) erhält man mit (VII.47) sofort:

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\hat{\varepsilon}_k}{\sqrt{\hat{\varepsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right), \qquad v_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\hat{\varepsilon}_k}{\sqrt{\hat{\varepsilon}_k^2 + \Delta_k^2}}\right). \qquad \text{(VII.92)}$$

Der Verlauf von u_k^2 und v_k^2 ist zusammen mit dem Hartree-Fock-Grenzfall in Fig. 39 wiedergegeben.

Setzt man (VII.92) in den Ausdruck für das Paarpotential (VII.88) ein, so ergibt sich die „Gap-Gleichung“:

$$\Delta_k = -\frac{1}{2}\sum_{k_1>0} \frac{\langle k-k|\bar{v}|k_1 -k_1\rangle}{\sqrt{\hat{\varepsilon}_{k_1}^2 + \Delta_{k_1}^2}}\,\Delta_{k_1}. \qquad \text{(VII.93)}$$

Wir sehen, daß die Gleichungen (VII.92) und (VII.93) für eine konstante Paarkraft den aus dem Variationsverfahren gewonnenen Ausdrücken (VII.66) und (VII.67) äquivalent sind. Denken wir uns also v_k und u_k aus der Bedingung $h_{kk'}=0$ gegeben, so ist $H_{20}=0$ und der Hamiltonoperator (VII.80) wird zu einem Hamiltonoperator für Quasiteilchen, ebenso wie (VII.79) ein Hamiltonoperator für echte Teilchen ist.

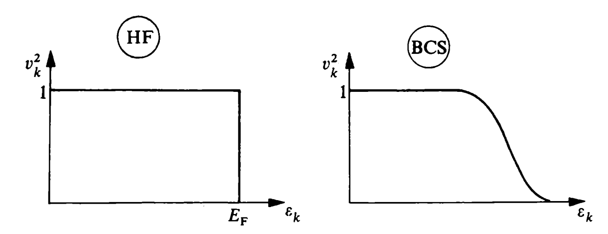


Fig. 39 Besetzungswahrscheinlichkeiten im HF- bzw. BCS-Modell.

Vernachlässigen wir die Wechselwirkung H_4 zwischen den Quasiteilchen, so erhält man einen Hamiltonoperator H_0 für freie Quasiteilchen. Unter der Annahme (VII.90a) und mit $\varepsilon_{kk'}=\hat{\varepsilon}_k\delta_{kk'}$, erhält man durch Einsetzen von (VII.92) in (VII.81b):

$$H_0 = U + \lambda\hat{N} + \sum_{k>0} \mathrm{e}_k(\alpha_k^\dagger\alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger\alpha_{-k}) \equiv U + \lambda\hat{N} + H_Q, \qquad \text{(VII.94a)}$$

$$\mathrm{e}_k = \sqrt{\hat{\varepsilon}_k^2 + \Delta_k^2}. \qquad \text{(VII.94b)}$$

(Im allgemeinen folgt aus (VII.82) für H_{11} die Form

$$H_{11} = \sum_{kk'} \frac{\varepsilon_{kk'}}{u_k u_{k'} - v_k v_{k'}} (\alpha_k^\dagger\alpha_{k'} + \alpha_{-k}^\dagger\alpha_{-k'}),$$

die man durch eine zusätzliche unitäre Transformation diagonalisieren kann). Für den BCS-Grundzustandserwartungswert von H_0 ergibt sich:

$$U + \lambda N = \sum_{k>0} (t_{kk} + \tfrac{1}{2}\Gamma_{kk}^{\mathrm{BCS}}) 2v_k^2 - \sum_{k>0} \Delta_k u_k v_k. \qquad \text{(VII.94c)}$$

Aus den Gleichungen (VII.94) ersieht man, daß es uns durch die Bogolyubov-Transformation, wie vermutet, gelungen ist, einen Teil der Restwechselwirkung zu diagonalisieren.

6. Diskussion der Gap-Gleichung

Bei der Auswertung von Gleichung (VII.93) stellt sich die Frage nach der Einschränkung des Summationsbereiches, d.h. wir müssen feststellen, welche Zustände den Hauptbeitrag in der Summe liefern. Betrachten wir zuerst den Gap-Parameter Δ_k für einen Zustand in der Nähe der Fermikante. Dann kommen die Hauptbeiträge zur Summe von Zuständen, die ebenfalls in der Nähe der Fermikante liegen. Denn für diese ist $\Delta_k/(\hat{\varepsilon}_k^2+\Delta_k^2)^{1/2}\simeq 1$ ($\hat{\varepsilon}_k \simeq 0$!), und die zugehörigen Matrixelemente haben relativ zu denen des übrigen Summationsbereiches ihren größten Wert, da links und rechts etwa die gleichen Zustände stehen und so die Wellenfunktionen einen maximalen Überlapp haben. Für Summationsindizes weit unterhalb bzw. weit oberhalb wird der Überlapp jedoch klein und außerdem die Größe $\Delta_k/(\hat{\varepsilon}_k^2+\Delta_k^2)^{1/2}$ sehr klein gegen 1, so daß diese Konfigurationen keinen wesentlichen Beitrag liefern.

Die gleichen Argumente gelten auch für Zustände $|k\rangle$, die weit von der Fermikante entfernt sind. Nur sind hier alle Summanden sehr klein, da für Zustände $|k_1\rangle$ aus der Umgebung der Fermikante das Matrixelement sehr klein ist, während für Zustände in der Nähe von $|k\rangle$ gilt: $\Delta_{k_1}/(\hat{\varepsilon}_k^2+\Delta_k^2)^{1/2}\ll 1$. Der Effekt der Paarwechselwirkung ist also praktisch auf eine Umgebung der Fermikante beschränkt; nur dort ist Δ_k von Null verschieden.

Bei sphärischen und nur schwach deformierten Kernen zeigen die Einteilchenniveaus eine ausgeprägte Schalenstruktur. Der Hauptbeitrag zur Summe in der Gap-Gleichung kommt von Übergängen in der gleichen Schale. Wir können daher jede Schale getrennt behandeln. Nach dem obigen erwarten wir für die inneren Schalen $\Delta_k\simeq 0$. Nur in der teilweise gefüllten Λ-Schale wird sich die Paarwechselwirkung bemerkbar machen, was auf das Bild des Seniority-Modells zurückführt. Bei stark deformierten Kernen ist die Schalenstruktur fast völlig verschwunden. Auch hier jedoch erstreckt sich die Summation nur über eine beschränkte Gruppe von Zuständen in der Nähe der Fermikante. Diese Gruppe wird gewöhnlich ebenfalls als Λ-Schale bezeichnet. Nach dem oben Gesagten erhält man für die Besetzungswahrscheinlichkeit v_k^2 den Verlauf von Fig. 39 (für $\Delta=0$ bzw. $\Delta\neq 0$).

Die Einschränkung der Paarwechselwirkung auf eine Umgebung der Fermikante ist auch der Grund für eine getrennte Behandlung von Neutronen und Protonen (zumindest für schwere Kerne). Für $A>150$ ist der Neutronenüberschuß $(N-Z)\gtrsim 20$. Die in der Nähe der Fermikante liegenden Neutronen- bzw. Protonenniveaus haben also (vgl. auch Kapitel I, Fig. 8b) nur einen geringen Überlapp, verglichen mit dem der

Protonen bzw. Neutronen untereinander. Für leichte Kerne kann man sich mit dem allgemeinen Argument behelfen, daß die Hauptbeiträge zum Paarungseffekt von Spinsingulettpaaren mit Gesamtdrehimpuls $I=0$ herrühren. Während identische Teilchen in relativen s-Zuständen ($L=0$) nur ein Singulett bilden können, können verschiedene Teilchen auch im Triplett auftreten, was den Paarungseffekt verringert. Camiz et al. [Ca 66] kommen tatsächlich zu dem Schluß, daß die Vernachlässigung von Neutron-Proton-Paarung eine gute Näherung ist. Damit läßt sich die Gesamtwellenfunktion als ein Produkt aus Protonen- und Neutronenfunktion darstellen:

$$|\mathrm{BCS}\rangle^{\mathrm{p,n}} = \prod_{k_1>0} (u_{k_1}^{(\mathrm{n})} + v_{k_1}^{(\mathrm{n})} a_{k_1}^{(\mathrm{n})\dagger} a_{-k_1}^{(\mathrm{n})\dagger}) \prod_{k_2>0} (u_{k_2}^{(\mathrm{p})} + v_{k_2}^{(\mathrm{p})} a_{k_2}^{(\mathrm{p})\dagger} a_{-k_2}^{(\mathrm{p})\dagger}) |0\rangle_0 . \quad \text{(VII.95)}$$

Trotz dieser beiden vereinfachenden Annahmen können die BCS-Gleichungen wegen ihrer Kompliziertheit numerisch nur mit Hilfe von Rechenmaschinen ausgewertet werden. Um jedoch den Einfluß der Paarwechselwirkung qualitativ studieren zu können, nehmen wir ein über den Bereich um die Fermikante konstantes Matrixelement der Wechselwirkung an:

$$|G| = -\langle k - k | \bar{v} | k_1 - k_1 \rangle \quad \text{(VII.96)}$$

Die Gap-Gleichung vereinfacht sich dann zu

$$\Delta = |G| \sum_{k>0}^{\Lambda} u_k v_k = \tfrac{1}{2} \sum_{k>0}^{\Lambda} \frac{|G| \Delta}{\sqrt{\hat{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} , \quad \text{(VII.97)}$$

wobei die Summation jetzt nur mehr über die Λ-Schale läuft. Die Gleichung (VII.97) hat stets die triviale Lösung $\Delta=0$ bzw. $u_k v_k = 0$. Falls die Paarwechselwirkung verschwindet oder hinreichend schwach ist, bleibt dies die einzige Lösung. Ist jedoch die Ungleichung

$$\frac{|G|}{2} \sum_{k>0}^{\Lambda} \frac{1}{|\hat{\varepsilon}_k|} > 1 \quad \text{(VII.98)}$$

erfüllt, dann existiert stets eine nichttriviale Lösung $\Delta > 0$. Dies ist immer dann der Fall, wenn die Paarkraft hinreichend stark bzw. die effektive Umgebung der Fermikante hinreichend groß ist. Diese Bedingung ist jedoch (nach Mang et al. [Ma 64]) eine Folge der Teilchenzahlverletzung.

Die Größenordnung der gemittelten Paar-Matrixelemente $|G|$ kann man z. B. aus dem even-odd-Effekt abschätzen (siehe z. B. Nilsson, Prior [NP 61], S. 18ff.). Dabei ergibt sich für Protonen $G_\mathrm{p} \simeq 17/A$ MeV, für Neutronen $G_\mathrm{n} \simeq 25/A$ MeV. Die Energielücke ist von der Größenordnung 1 MeV.

7. Anregungszustände im BCS-Formalismus

Zustände mit ungeraden Teilchenzahlen sind dadurch gegeben, daß ein Quasiteilchen vorhanden ist:

$$\alpha_{k'}^{\dagger}|\mathrm{BCS}\rangle = a_{k'}^{\dagger} \prod_{k \neq k'} (u_k + v_k a_k^{\dagger} a_{-k}^{\dagger})|0\rangle_0, \qquad \text{(VII.99a)}$$

$$\alpha_{-k'}^{\dagger}|\mathrm{BCS}\rangle = a_{-k'}^{\dagger} \prod_{k \neq k'} (u_k + v_k a_k^{\dagger} a_{-k}^{\dagger})|0\rangle_0. \qquad \text{(VII.99b)}$$

Dieser Zustand kann hierbei je nach den Quantenzahlen k Grundzustand oder angeregter Zustand des ungeraden Systems bedeuten. Einen Anregungszustand mit gerader Teilchenzahl erhält man durch Erzeugung von zwei Quasiteilchen:

$$\alpha_{k'}^{\dagger}\alpha_{k''}^{\dagger}|\mathrm{BCS}\rangle = a_{k'}^{\dagger} a_{k''}^{\dagger} \prod_{k \neq k', k''} (u_k + v_k a_k^{\dagger} a_{-k}^{\dagger})|0\rangle_0. \qquad \text{(VII.100)}$$

Dies erkennt man, wenn man den Eigenwert von H_Q (VII.94a) bezüglich dieses Zustandes berechnet:

$$H_Q \alpha_{k'}^{\dagger}\alpha_{k''}^{\dagger}|\mathrm{BCS}\rangle = (\mathrm{e}_{k'} + \mathrm{e}_{k''})\alpha_{k'}^{\dagger}\alpha_{k''}^{\dagger}|\mathrm{BCS}\rangle \qquad \text{(VII.101)}$$

Ein Zustand, in welchem ein Paar aufgebrochen ist, der also zwei Quasiteilchen enthält, hat damit gegenüber dem Grundzustand die Anregungsenergie $\mathrm{e}_{k'} + \mathrm{e}_{k''}$, für die folgende Ungleichung gilt:

$$\mathrm{e}_{k'} + \mathrm{e}_{k''} \geqslant 2\Delta. \qquad \text{(VII.102)}$$

Der erste Anregungszustand liegt also um mindestens 2Δ über dem Grundzustand, während für ein System mit ungerader Teilchenzahl die Anregungsenergie durch

$$\mathrm{e}_k - \mathrm{e}_{k_0} = \sqrt{\hat{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2} - \Delta \qquad \text{(VII.103)}$$

gegeben ist. e_{k_0} bedeutet dabei die Energie des ungeraden Teilchens im Grundzustand ($\hat{\varepsilon}_{k_0} \simeq 0$). Das Einquasiteilchenspektrum zeigt also keine Energielücke.

8. Lösung der Gap-Gleichung[1]

Um eine analytische Lösung der Gap-Gleichung bewerkstelligen zu können, müssen wir einige zusätzliche Annahmen machen. Fassen wir nämlich den Gap-Parameter 2Δ als wirkliche Energielücke auf, d.h.

[1] Im folgenden halten wir uns eng an die von Belyaev [Be 59] gegebene Darstellung.

$\Delta \gg \hat{\varepsilon}_k$ (die niedrigsten Einteilchenanregungen liegen im Nilsson-Modell im Bereich starker Deformation bei 100 keV), so können wir die Summation in (VII.97) näherungsweise durch eine Integration ersetzen:

$$1=\tfrac{1}{2}|G|\int\limits_a^b \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}}\,\rho(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon. \qquad \text{(VII.104a)}$$

Dabei ist $\rho(\varepsilon)$ die mittlere Niveaudichte, ε' bzw. ε'' sind die Grenzen der Λ-Schale und

$$a=\varepsilon'-\lambda, \quad b=\varepsilon''-\lambda \qquad \text{(VII.104b)}$$

(λ ist hierbei wieder die Fermienergie).

Innerhalb einer Schale bzw. bei stark deformierten Kernen innerhalb eines beschränkten Bereichs ist die Annahme einer konstanten Niveaudichte $\bar{\rho}$ vertretbar. Wir führen noch die dimensionslose Größe

$$\eta=(\bar{\rho}|G|)^{-1} \qquad \text{(VII.105)}$$

ein und erhalten nach Integration:

$$\operatorname{arsinh}\frac{b}{\Delta}-\operatorname{arsinh}\frac{a}{\Delta}=2\eta. \qquad \text{(VII.106a)}$$

Faßt man die beiden arsinh-Funktionen zusammen und löst nach dem Argument auf, so folgt:

$$b\sqrt{a^2+\Delta^2}-a\sqrt{b^2+\Delta^2}=\Delta^2\sinh 2\eta. \qquad \text{(VII.106b)}$$

Daraus ergibt sich:

$$\Delta=\frac{1}{\sinh 2\eta}\left[b^2+a^2-2ab\cosh 2\eta\right]^{1/2}. \qquad \text{(VII.106c)}$$

Die mittlere Teilchenzahl im BCS-Modell ist durch den Ausdruck (VII.54) gegeben. Durch die Beziehung (VII.55) wird die Fermienergie λ festgelegt. Sei n_Λ die Anzahl der Teilchen in der teilweise gefüllten Λ-Schale, dann erhalten wir nach Umwandlung der Summe in (VII.54) in ein Integral:

$$n_\Lambda=2\int\limits_a^b \frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}}\right)\bar{\rho}\,\mathrm{d}\varepsilon. \qquad \text{(VII.107)}$$

Drückt man die Anzahl der Paarzustände Ω in der Λ-Schale durch die mittlere Zustandsdichte $\bar{\rho}$ aus,

$$\Omega=\bar{\rho}(\varepsilon''-\varepsilon'), \qquad \text{(VII.108a)}$$

und führt den sogenannten Besetzungsfaktor der Λ-Schale ein,

$$\chi_N = 1 - \frac{n_\Lambda}{\Omega}, \tag{VII.108b}$$

so ergibt eine längere algebraische Rechnung nach Ausführung der Integration (VII.107) und unter Benutzung von (VII.106c):

$$\lambda = \frac{\varepsilon'' + \varepsilon'}{2} - \frac{\varepsilon'' - \varepsilon'}{2} \chi_N \operatorname{ctgh} \eta. \tag{VII.109}$$

Setzt man (VII.109) in (VII.106c) ein, so erhält man schließlich:

$$\Delta = \frac{\varepsilon'' - \varepsilon'}{2 \sinh \eta} (1 - \chi_N^2)^{1/2}. \tag{VII.110a}$$

Unter der Annahme schwacher Kopplung, d. h. $(\bar{\rho}|G|)^{-1} \gg 1$, folgt für Δ

$$\Delta \sim e^{-\frac{1}{\bar{\rho}|G|}}. \tag{VII.110b}$$

Die Energielücke kann also nicht als eine störungstheoretische Entwicklung nach Potenzen der Stärke der Wechselwirkung gewonnen werden. Gleichung (VII.110a) war unter der Voraussetzung abgeleitet worden, daß Δ nicht kleiner ist als der Niveauabstand, d. h.

$$\Delta \bar{\rho} > 1 \tag{VII.111a}$$

oder

$$\frac{1}{2 \sinh \eta} \sqrt{n_\Lambda (2\Omega - n_\Lambda)} > 1. \tag{VII.111b}$$

Für $\eta \leqslant 1$ ist diese Ungleichung stets erfüllt. Für $\eta \gg 1$ (schwache Paarwechselwirkung oder geringe Niveaudichte) ist die Ungleichung (VII.111b) nur für genügend große Werte von $n_\Lambda(2\Omega - n_\Lambda)$ erfüllt.

9. *Grundzustandsenergie und Paarungsenergie*

Die Energie des Quasiteilchenvakuums ist durch (VII.94c) gegeben. Mit der Abkürzung $\tilde{\varepsilon}_k = t_{kk} + \Gamma_{kk}^{\mathrm{BCS}}$ lautet die Grundzustandsenergie:

$$U = \sum_{k>0} [\tilde{\varepsilon}_k 2 v_k^2 - \Delta_k u_k v_k]. \tag{VII.112}$$

Mit den obigen Näherungen erhalten wir für die Gesamtenergie der Λ-Schale:

$$U_\Lambda = 2 \int_a^b \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}\right) \varepsilon \bar{\rho} \, d\varepsilon - \frac{\Delta^2}{|G|}. \tag{VII.113}$$

Die Größe U entspricht jedoch dem Modellhamiltonoperator H' in (VII.80). Für die Energie, die zum ursprünglichen Hamiltonoperator H (VII.79) gehört, ergibt sich mit (VII.109) und (VII.113):

$$U_\Lambda + \lambda N = \tfrac{1}{2}(\varepsilon' + \varepsilon'')n_\Lambda - \tfrac{1}{4}\Omega(\varepsilon'' - \varepsilon')(1 - \chi_N^2)\,\mathrm{ctgh}\,\eta. \quad \text{(VII.114)}$$

Der letzte Term in (VII.114) verschwindet für abgeschlossene Schalen, da hierfür der Faktor $(1-\chi_N^2)$ Null wird.

Mit den obigen Näherungen kann auch der Beitrag der Paarungswechselwirkung zur Gesamtgrundzustandsenergie abgeschätzt werden. Wir benutzen dazu Gleichung (VII.104a) und erhalten für U_Λ:

$$U_\Lambda = \int_a^b \left(1 - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}\right) \bar{\rho}\,\varepsilon\,\mathrm{d}\varepsilon - \frac{\Delta^2}{2} \int_a^b \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}\,\bar{\rho}\,\mathrm{d}\varepsilon. \quad \text{(VII.115)}$$

Diese Energie ist zu vergleichen mit der Energie U_Λ^0 der bis zur Fermikante gefüllten Λ-Schale im Fall $\Delta = 0$:

$$U_\Lambda^0 = 2\int_a^0 \bar{\rho}\,\varepsilon\,\mathrm{d}\varepsilon. \quad \text{(VII.116)}$$

Der Beitrag E^{P} der Paarungsenergie zur Gesamtgrundzustandsenergie ist dann gegeben durch:

$$E^{\mathrm{P}} = U_\Lambda - U_\Lambda^0. \quad \text{(VII.117)}$$

Betrachten wir eine halbaufgefüllte Schale, also $n_\Lambda = \Omega$, so gilt:

$$\lambda = \tfrac{1}{2}(\varepsilon' + \varepsilon''), \qquad b = -a. \quad \text{(VII.118)}$$

Für E^{P} ergibt sich somit:

$$E^{\mathrm{P}} = \bar{\rho}(b^2 - b\sqrt{b^2 + \Delta^2}) \simeq -\tfrac{1}{2}\bar{\rho}\,\Delta^2, \quad (b \gg \Delta). \quad \text{(VII.119)}$$

Dies ist die Paarungsenergie für Neutronen bzw. Protonen. Die gesamte Paarungsenergie des Kerns ist gleich der Summe der beiden:

$$E_{\text{total}}^{\mathrm{P}} = E_{(\mathrm{n})}^{\mathrm{P}} + E_{(\mathrm{p})}^{\mathrm{P}} \simeq -\bar{\rho}\,\Delta^2. \quad \text{(VII.120)}$$

Nimmt man als charakteristische Werte für die Energielücke $\Delta = 0{,}5\ldots0{,}6$ MeV und als Niveauabstand $1/\bar{\rho} = 0{,}2\ldots0{,}3$ MeV, so erhält man:

$$E_{\text{total}}^{\mathrm{P}} \simeq -(0{,}8\ldots1{,}8)\,\mathrm{MeV}. \quad \text{(VII.121)}$$

Die totale Paarungsenergie des Kerns ist also erstaunlich klein, verglichen mit der gesamten Bindungsenergie.

10. Unschärfe der Teilchenzahl

Wie wir bereits gesehen haben, stellt die BCS-Wellenfunktion einen Zustand mit unscharfer Teilchenzahl dar. Sie ist nur dann eine brauchbare Näherung des tatsächlichen Zustandes, wenn im wesentlichen nur solche Zustände beigemischt sind, die annähernd die gleiche Teilchenzahl besitzen. Um dies abschätzen zu können, berechnen wir die mittlere quadratische Schwankung $\Delta N = (\langle BCS|N^2|BCS\rangle - (\langle BCS|N|BCS\rangle)^2)^{1/2}$ der Teilchenzahl im BCS-Grundzustand. Es ergibt sich:

$$(\Delta N)^2 = \sum_{k>0} \frac{\Delta_k^2}{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}. \qquad \text{(VII.122)}$$

Mit den bereits benutzten Näherungen folgt daraus:

$$(\Delta N)^2 = \bar{\rho}\,\Delta\left(\operatorname{arctg}\frac{b}{\Delta} - \operatorname{arctg}\frac{a}{\Delta}\right). \qquad \text{(VII.123)}$$

Im Grenzfall schwacher Paarwechselwirkung oder geringer Niveaudichte erhält man aus (VII.123) und (VII.110a):

$$(\Delta N)^2 \simeq \bar{\rho}\,\Delta\pi, \qquad \eta \gg 1. \qquad \text{(VII.124)}$$

Diese Näherung ist für stark deformierte Kerne in etwa erfüllt. Setzt man charakteristische Werte für $\bar{\rho}$ und $|G|$ ein, so ergibt sich für $\eta \simeq 4\ldots5$ und für die Schwankungsbreite $\Delta N \simeq \sqrt{6}$. Nimmt man an, daß sich in der Λ-Schale $n_\Lambda = 20$ Teilchen befinden, so ist $\Delta N < \sqrt{n_\Lambda}$, d.h. im BCS-Grundzustand werden in diesem Fall zum betrachteten Kern nur geringfügig Komponenten anderer Kerne beigemischt sein.

Im anderen Grenzfall $\eta \ll 1$ nehmen wir in (VII.123) nur die führenden Terme in η mit und erhalten:

$$(\Delta N)^2 \simeq \frac{\Omega}{2\sinh\eta}(1-\chi_N^2)^{1/2}\operatorname{arctg}[2(1-\chi_N^2)^{1/2}\sinh\eta], \quad \eta \ll 1. \qquad \text{(VII.125)}$$

Oder nach Entwicklung von $\sinh\eta$:

$$(\Delta N)^2 \simeq \Omega(1-\chi_N^2) = 2n_\lambda\left(1 - \frac{n_\lambda}{2\Omega}\right). \qquad \text{(VII.126)}$$

Für *ein* Nukleonenpaar in der Λ-Schale ist $\Delta N \simeq 2$. Bei halbgefüllter Schale ($n_\Lambda = \Omega$), wo ΔN den größten Wert erreicht, ist die Schwankungsbreite der Teilchenzahl von der Größenordnung $\sqrt{n_\lambda}$. Die BCS-Wellenfunktion z.B. von U^{236} enthält große Anteile von U^{234} und U^{238}, aber auch Th^{234} und Pu^{238}. Dabei ist jedoch zu beachten, daß die bei-

gemischten Komponenten in allen Parametern außer λ sehr gut mit dem (Z_0, N_0)-Kern (hier U^{236}) übereinstimmen, so z.B. in Δ_n, Δ_p und dem Deformationsparameter δ.

11. Restwechselwirkung zwischen den Quasiteilchen

Um zum Modell freier Quasiteilchen zu gelangen, haben wir im Hamiltonoperator (VII.80) den Wechselwirkungsterm H_4 vernachlässigt. Dies ist dann eine gute Näherung, wenn man den Grundzustand betrachtet. Denn nur

$$H_{40} = |G| \sum_{k,k'>0} (u_k^2 v_{k'}^2 \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{k'}^\dagger \alpha_{-k'}^\dagger + \text{h.k.}) \qquad \text{(VII.127)}$$

besitzt nicht verschwindende Matrixelemente mit dem Quasiteilchenvakuum. Die Größe dieser Kopplung ist daher ein Maß dafür, wie stark die Einschränkungen sind, die bei dem in Abschnitt 4 besprochenen BCS-Variationsansatz der exakten Grundzustandswellenfunktion auferlegt werden. Berücksichtigt man H_{40} in Schrödingerscher Störungstheorie, so erhält man als verbesserte Grundzustandswellenfunktion:

$$|\text{BCS}\rangle^{(1)} = |\text{BCS}\rangle - |G| \sum_{k'>k>0} \frac{u_k^2 v_{k'}^2 + u_{k'}^2 v_k^2}{2(\text{e}_k + \text{e}_{k'})} \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{k'}^\dagger \alpha_{-k'}^\dagger |\text{BCS}\rangle. \qquad \text{(VII.128)}$$

Wie man sich leicht überlegt, sind die Korrekturen zur Grundzustandswellenfunktion von der Größenordnung $|G|/2\Delta$. Man kann deshalb die Größe

$$\Omega_{\text{eff}} \equiv \frac{2\Delta}{|G|} = \sum_{k>0} \frac{1}{\sqrt{1 + (\hat{\varepsilon}_k/\Delta)^2}} \qquad \text{(VII.129a)}$$

als Maß für die Genauigkeit der BCS-Näherung nehmen. Liest man Gleichung (VII.129a) als

$$\Delta = \tfrac{1}{2} |G| \Omega_{\text{eff}} \qquad \text{(VII.129b)}$$

und vergleicht dies mit Gleichung (VII.68), so erkennt man, daß Ω_{eff} von der Größenordnung von Ω, der Zahl der Zustände in der Λ-Schale ist. Bei numerischen Rechnungen ([NP 61], S. 10) findet man:

$$\Omega_{\text{eff}} = 5 \ldots 10. \qquad \text{(VII.129c)}$$

Der Grundzustand eines Systems mit ungerader Teilchenzahl wird auch durch H_{31} beeinflußt:

$$H_{31}=|G| \sum_{kk'>0} (u_k^2-v_k^2) u_{k'} v_{k'} \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger (\alpha_{k'}^\dagger \alpha_{k'} + \alpha_{-k'}^\dagger \alpha_{-k'}) + \text{h.k.} \quad \text{(VII.130)}$$

Die Schrödingersche Störungstheorie liefert erst in zweiter Ordnung eine Absenkung der Grundzustandsenergie um $-\Delta E_{31}$:

$$\Delta E_{31} = \frac{G^2}{8} \sum_{k>0} \frac{1}{e_k} \left(1 - \frac{\Delta^2}{e_k^2}\right) \leqslant \frac{|G|}{4}. \quad \text{(VII.131)}$$

Numerische Rechnungen ergeben einen Wert, der bei 50–80% dieser oberen Schranke liegt. H_{40}, das den Einquasiteilchenzustand mit Fünfquasiteilchenzuständen koppelt, liefert ebenfalls Beiträge. Auch hier ist die Absenkung der Grundzustandsenergie etwa $|G|/4$ (d. h. einige 10 keV).

12. Der „blocking"-Effekt

Der Grundzustand eines Systems mit ungerader Teilchenzahl wird durch die Wellenfunktion

$$\alpha_{k_0}^\dagger |\text{BCS}\rangle = a_{k_0}^\dagger \prod_{k \neq k_0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) |0\rangle_0 \quad \text{(VII.132)}$$

beschrieben. Das ungepaarte Teilchen befindet sich im Zustand $|k_0\rangle$ und wird von der Paarwechselwirkung nicht beeinflußt. Das Niveau k_0, das sich in der Nähe der Fermikante befindet, ist aufgrund des Pauliprinzips für Teilchenpaare verboten, was auch in (VII.132) zum Ausdruck kommt. Berücksichtigt man dies bei der Berechnung der u_k und v_k, so sind diese zwar immer noch (für $k \neq k_0$) durch die Gleichungen (VII.92) gegeben, in den Summen (VII.93) und (VII.54), die Δ_k bzw. mit (VII.107) λ bestimmen, wird jedoch der Index k_0 ausgeschlossen; weiterhin ist in (VII.54) N durch $N-1$ zu ersetzen. Es folgt also:

$$\Delta = |G| \sum_{k \neq k_0} u_k v_k, \quad \text{(VII.133)}$$

$$N = 1 + \sum_{k \neq k_0} 2 v_k^2. \quad \text{(VII.134)}$$

Im allgemeinen wird der „blocking"-Effekt vernachlässigt, da er von der Größenordnung $1/\Omega_{\text{eff}}$ ist. Wie jedoch Soloviev [So 61] und Nilsson und Prior [NP 61] zeigten, kann in einigen Fällen, die hier nicht diskutiert werden sollen, der blocking-Effekt Korrekturen bis zu 30% liefern. Da für Zweiquasiteilchenzustände in der Summe von Formel (VII.93) zwei Zustände „geblockt" sind, wird Δ ziemlich stark reduziert und man könnte versucht sein, dies durch den Ansatz (vgl. VII.99)

$$|k', -k''\rangle = a_{k'}^\dagger a_{-k''}^\dagger \prod_{k \neq k', k''} (u_k^{(k',k'')} + v_k^{(k',k'')} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) |0\rangle_0 \quad \text{(VII.135)}$$

wie im Fall des Einquasiteilchenzustandes zu berücksichtigen. Bei der Berechnung von $u_k^{(k',k'')}$ und $v_k^{(k',k'')}$ sollen zwei Einteilchenniveaus blockiert sein. Falls man dies wünscht, besitzt der Quasiteilchenformalismus keine Vorteile, da man dann gezwungen ist, für angeregte Zustände ein vom BCS-Grundzustand verschiedenes Vakuum anzunehmen. Außerdem wäre die Anregungsenergie nur durch erneute Auswertung der Gleichung (VII.94c) für U zu gewinnen.

13. Geisterzustände

Damit das gesamte Konzept der Energielücke seinen Sinn behält, darf eine Berücksichtigung des Wechselwirkungsterms H_4 keine Anregungszustände mehr in das Gebiet der Energielücke absenken. Dies soll an H_{22} genauer untersucht werden:

$$H_{22} = -|G| \sum_{k,k'>0} [(u_k^2 u_{k'}^2 + v_k^2 v_{k'}^2)\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k'} \alpha_{k'} + u_k v_k u_{k'} v_{k'} (\alpha_k^\dagger \alpha_{k'}^\dagger \alpha_{k'} \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k'}^\dagger \alpha_{-k'} \alpha_{-k} + 2\alpha_{k'}^\dagger \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k} \alpha_{k'})]. \tag{VII.136}$$

Dazu diagonalisieren wir H_{22} im Unterraum folgender Zweiquasiteilchenzustände:

$$|k, -k\rangle \equiv \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger |\mathrm{BCS}\rangle. \tag{VII.137a}$$

Von Null verschieden sind dann die Matrixelemente:

$$\langle -kk|H_{22}|k-k\rangle = -|G|, \tag{VII.137b}$$

$$\langle -k'k'|H_{22}|k-k\rangle = -|G|(u_k^2 u_{k'}^2 + v_k^2 v_{k'}^2), \quad k \neq k'. \tag{VII.137c}$$

Das negative Diagonalelement ist von der Größenordnung 5–10% der Energielücke. Wichtiger sind jedoch die Außerdiagonalelemente (VII.137c), die die ziemlich dichtliegenden Anregungszustände mischen. Der Faktor

$$u_k^2 u_{k'}^2 + v_k^2 v_{k'}^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\hat{\varepsilon}_k \hat{\varepsilon}_{k'}}{\mathrm{e}_k \mathrm{e}_{k'}}\right) \tag{VII.137d}$$

ist für niedrige Anregungen von der Größenordnung 1/2 und reduziert das Matrixelement kaum. Die Berücksichtigung des H_{22}-Terms scheint daher das ganze Konzept der Energielücke zunichte zu machen, da man erwartet, daß ein oder mehrere Niveaus in die Energielücke abgesenkt werden. Der Ausweg besteht in einer Elimination von Geisterzuständen.

Um dies leichter diskutieren zu können, benutzen wir das entartete Modell. In diesem sind alle Außerdiagonalelemente gleich groß:

$$\langle -k' k' | H_{22} | k - k \rangle_{\text{e.M.}} = -\kappa |G|, \tag{VII.138a}$$

$$\kappa = 1 - \frac{N}{\Omega}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{N}{\Omega}\right). \tag{VII.138b}$$

κ liegt also innerhalb folgender Grenzen:

$$\tfrac{1}{2} \leqslant \kappa \leqslant 1. \tag{VII.138c}$$

Für die Matrix von H_{22} erhält man somit:

$$-|G| \begin{pmatrix} 1 & \kappa & \kappa \cdots \\ \kappa & 1 & \kappa \cdots \\ \kappa & \kappa & 1 \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \ddots \end{pmatrix} = H_{22}^{\text{e.M.}}. \tag{VII.139}$$

Diagonalisieren wir (VII.139) im Raum der Zweiquasiteilchenzustände (VII.137a), so finden wir, daß als einziger der Zustand

$$|\Psi^{G}\rangle = \sum_{k>0} \alpha_k^{\dagger} \alpha_{-k}^{\dagger} |\text{BCS}\rangle \sim (\hat{N} - N)|\text{BCS}\rangle \tag{VII.140}$$

sehr stark abgesenkt wird und zwar um den Betrag

$$\Delta E = -|G|(1 + \kappa\Omega - \kappa). \tag{VII.141}$$

Projiziert man jedoch den Zustand $|\Psi^{G}\rangle$ auf feste Teilchenzahl (vgl. Kapitel X), so erweist sich $|\Psi^{G}\rangle$ analog zu dem in Kapitel VI, Abschn. 9, diskutierten Zustand $P_z|0\rangle$ als proportional zum Grundzustand und damit als geisterhaft. Behandelt man analog zu Kapitel VI den Wechselwirkungsterm H_4 in RPA (Kuo et al. [Ku 66]), so erhalten alle Geisterzustände bei selbstkonsistenter Formulierung automatisch die Anregungsenergie Null.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die Anwendung des Superflüssigkeitsmodells auf den Atomkern sich als sehr fruchtbar erwiesen hat. Sämtliche in der Einleitung erwähnten Experimente konnten zunächst qualitativ reproduziert werden. In vielen Fällen wurde sogar eine recht gute quantitative Übereinstimmung erzielt.

VIII. GLEICHGEWICHTSDEFORMATIONEN IM BCS-MODELL

1. Allgemeines

Bereits in Kapitel III hatten wir im Rahmen des Nilsson-Modells versucht, die Gleichgewichtsdeformation des Atomkerns zu berechnen, indem wir die Gesamtenergie als Funktion der Deformation bestimmten und den Gleichgewichtswert des Deformationsparameters durch das Minimum der Energie festlegten. Wie in Abschnitt 1 des letzten Kapitels diskutiert, kann jedoch die Paarkraft einen sehr starken Einfluß auf die Deformation haben, da die zu $I=0$ gekoppelten Paare eine kugelsymmetrische Gestalt des Kerns begünstigen. Wir werden deshalb die Kerndeformation noch einmal im Rahmen des BCS-Formalismus behandeln und die beiden konkurrierenden Effekte, Deformation und Paarung, etwas eingehender diskutieren. Entwickeln wir dazu das Zweiteilchenpotential nach Kugelfunktionen

$$v(r_{ij}) = \sum_k f_k(r_i, r_j) P_k(\cos\Theta_{ij}),$$

so sehen wir leicht ein, daß die Komponenten mit großen k-Werten kurzreichweitigen Kräften entsprechen, also im wesentlichen durch die Paarkraft wiedergegeben werden, während die Komponenten niedriger k-Werte den langreichweitigen Anteil beinhalten. Nehmen wir nämlich an, daß die Bahnen der Teilchen i und j auf ein kleines radiales Gebiet beschränkt sind, so kann die r_i, r_j-Abhängigkeit für ein bestimmtes k vernachlässigt werden. Die Funktion P_k ist nur zwischen den Grenzen $\Theta_{ij}=0$ und $\Theta_{ij}\sim 1/k$ wesentlich von Null verschieden (Fig. 40a), d. h., die Teilchen i und j sind für ein bestimmtes k nur dann korreliert, wenn $r_{ij}<R/k$ (R ist der Mittelwert von r_i und r_j (Fig. 40b).

Je größer daher die Stärke der hohen k-Komponenten ist, desto kurzreichweitiger ist die Kraft, je stärker die niedrigen k-Komponenten sind, desto langreichweitiger ist sie. Das mittlere Einteilchenpotential wird hauptsächlich von den langreichweitigen Anteilen der Zweiteilchenwechselwirkung aufgebaut, da für ein herausgegriffenes Teilchen nur diese Anteile bezüglich einer größeren Anzahl von Nachbarn spürbar werden, während es die kurzreichweitigen Anteile nur von einigen weni-

gen Teilchen in seiner unmittelbaren Umgebung spürt. Mit der obigen Entwicklung des Zweiteilchenpotentials bedeutet dies, daß nach einer Mittelung im Hartree-Fockschen Sinne der Term mit $k=0$ einem mittleren Zentralfeld, der mit $k=2$ einer Quadrupolkorrektur $\sim Y_2^0(\vartheta)$ entspricht. ($k=1$ liefert für das mittlere Feld keinen Beitrag, da $Y_1^0(\vartheta)$ einer Verschiebung des festgehaltenen Schwerpunkts entspräche).

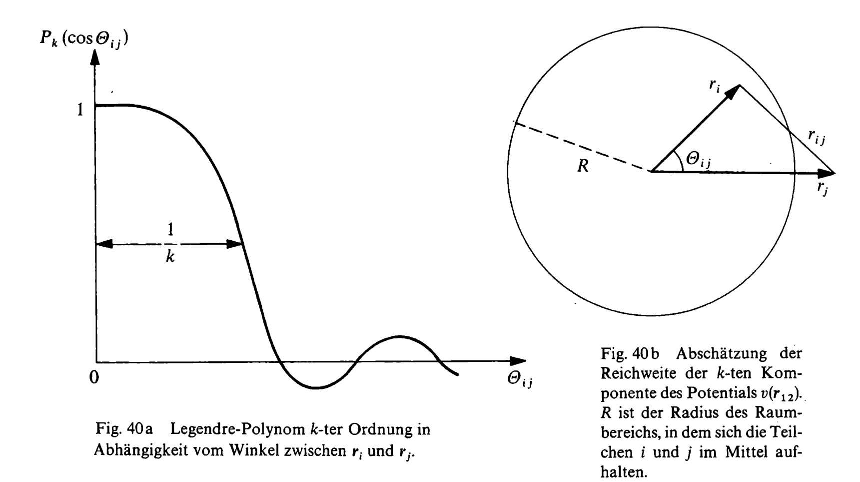


Fig. 40a Legendre-Polynom k-ter Ordnung in Abhängigkeit vom Winkel zwischen r_i und r_j.

Fig. 40b Abschätzung der Reichweite der k-ten Komponente des Potentials $v(r_{12})$. R ist der Radius des Raumbereichs, in dem sich die Teilchen i und j im Mittel aufhalten.

Belyaev [Be 59] hat für ein deformiertes Einteilchenpotential unter Berücksichtigung einer Paarkraft die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit des Deformationsparameters berechnet und durch Aufsuchen des Minimums der Energie die stabile Gleichgewichtsdeformation gefunden. Als Nebenbedingung wurde dabei gefordert, daß das berechnete und das gemessene Quadrupolmoment übereinstimmen. Die Ergebnisse zeigen, daß ganz allgemein durch die Paarung die Deformation etwas verringert wird. Insbesondere wird der schnelle Übergang von einer auch in der Nähe abgeschlossener Schalen noch kugelförmigen Gestalt des Kerns zu einer stabilen Deformation reproduziert. Bés und Szymansky [BS 61] führten mit derselben Methode umfangreiche Rechnungen in der Gegend der seltenen Erden und Actiniden durch und erzielten gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

Dietrich, Mang und Pradal ([DMP 66], im folgenden kurz als DMP bezeichnet) verbessern die oben genannte Methode hauptsächlich in zwei Punkten:

a) Sie benützen Zweiteilchenkräfte mit endlicher Reichweite, Spinabhängigkeit und Austauschcharakter im Gegensatz zu einer reinen Paarkraft;

b) sie bestimmen den Grundzustand ohne Nebenbedingungen, wie sie in den Arbeiten von Nilsson [Ni 55] und Bés und Szymanski [BS 61] verwendet werden.

In den folgenden Abschnitten wollen wir die Arbeit von DMP etwas eingehender diskutieren.

2. *Lösung der HFB-Gleichungen*

Allgemeine Methode. Die Diskussion des Gleichungssystems

$$h_{\nu\nu'} = 0 \qquad \text{(VIII. 1)}$$

im letzten Kapitel (VII. 82) zeigte bereits, daß die Kopplung zwischen dem Diagonalanteil dieser Gleichung und dem Außerdiagonalteil nur für ganz spezielle Zweiteilchenwechselwirkungen verschwindet. Für eine allgemeine Kraft mit Austauschcharakter sind also die Zustände und ihre Besetzungswahrscheinlichkeiten nicht unabhängig voneinander bestimmbar. Es ist zweckmäßig, die Zustände nach einem geeigneten Orthonormalsystem zu entwickeln:

$$|\nu\rangle = \sum_{k>0} D_\nu^k |k\rangle, \qquad \text{(VIII. 2)}$$

$$|-\nu\rangle = \sum_{k>0} D_{-\nu}^{-k} |-k\rangle, \qquad \text{(VIII. 3)}$$

wobei $|-\nu\rangle$ dem zu $|\nu\rangle$ zeitgespiegelten Zustand entspricht:

$$|-\nu\rangle = K|\nu\rangle, \quad \nu > 0 \qquad \text{(VIII. 4)}$$

(In Gleichung (VIII. 3) geht die Annahme axialsymmetrisch deformierter Kerne ein; vgl. auch (VIII. 15)).

Aus (VIII. 2) und (VIII. 4) folgt:

$$|-\nu\rangle = \sum_{k>0} D_\nu^{k*} |-k\rangle \qquad \text{(VIII. 5)}$$

Mit (VIII. 3) heißt das:

$$D_\nu^{k*} = D_{-\nu}^{-k}. \qquad \text{(VIII. 6)}$$

Die Transformation (VIII.2), (VIII.3) ist orthogonal:

$$\sum_k D^k_{\nu_1} D^k_{\nu_2} = \delta_{\nu_1 \nu_2}, \tag{VIII.7}$$

$$\sum_\nu D^{k_1}_\nu D^{k_2}_\nu = \delta_{k_1 k_2}. \tag{VIII.8}$$

Die in (VIII.1) auftretenden Matrixelemente lauten, ausgedrückt durch die Koeffizienten D:

$$\langle \nu_1 \nu_2 | \bar{v} | \nu_3 \nu_4 \rangle = \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \langle k_1 k_2 | \bar{v} | k_3 k_4 \rangle D^{k_1}_{\nu_1} D^{k_2}_{\nu_2} D^{k_3}_{\nu_3} D^{k_4}_{\nu_4}, \tag{VIII.9}$$

$$\langle \nu_1 | t | \nu_2 \rangle = \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 | t | k_2 \rangle D^{k_1}_{\nu_1} D^{k_2}_{\nu_2}. \tag{VIII.10}$$

Die Lösung von (VIII.1) beinhaltet also die Bestimmung der Transformationskoeffizienten D und der Besetzungswahrscheinlichkeiten u, v. Diese Aufgabe stellt ein Selbstkonsistenzproblem dar, das iterativ bewältigt werden kann. Ausgehend von einem geeignet gewählten Satz von Einteilchenzuständen (die „Nilsson-Rechnung“, die diesen Satz liefert, wird unten genauer diskutiert) berechnet man aus der BCS-Gleichung, dem Diagonalanteil von (VIII.1),

$$\varepsilon_{\nu\nu} u_\nu v_\nu - \tfrac{1}{2} \Delta_{\nu-\nu} (u_\nu^2 - v_\nu^2) = 0, \tag{VIII.11}$$

die Besetzungszahlen u_ν, v_ν, die man in die verallgemeinerte Hartree-Fock-Gleichung

$$\varepsilon_{\nu_1 \nu_2} (u_{\nu_1} v_{\nu_2} + u_{\nu_2} v_{\nu_1}) - \Delta_{\nu_1 - \nu_2} (u_{\nu_1} u_{\nu_2} - v_{\nu_1} v_{\nu_2}) = 0 \tag{VIII.12}$$

bzw.

$$\varepsilon_{\nu_1 \nu_2} (v_{\nu_1}^2 - v_{\nu_2}^2) - \Delta_{\nu_1 - \nu_2} (u_{\nu_1} v_{\nu_1} - u_{\nu_2} v_{\nu_2}) = 0, \qquad \nu_1 \neq \nu_2, \tag{VIII.13}$$

einsetzt (Gleichung (VIII.13) erhält man durch Multiplikation von (VIII.12) mit $(u_{\nu_1} v_{\nu_1} - u_{\nu_2} v_{\nu_2})$).

Der neue aus (VIII.13) gewonnene Satz von Koeffizienten D wird wiederum in (VIII.11) benutzt, um neue Besetzungszahlen zu ermitteln. Dieses Verfahren wird solange fortgesetzt, bis sich zwei aufeinanderfolgende Iterationsschritte nur mehr geringfügig unterscheiden.

Die begrenzte Leistungsfähigkeit elektronischer Rechenanlagen macht einige Näherungen unumgänglich, die eine Einschränkung dieses Programms zur Folge haben. Hierzu ist die Begrenzung des benutzten Konfigurationsraumes zu rechnen. Schreibt man die Zustände $|\nu\rangle$ in der Form $|\alpha m\rangle$ mit

$$|\alpha m\rangle = \sum_{njl} D^{njl}_\alpha (m) |n j l m\rangle \tag{VIII.14}$$

(die Quantenzahl m der Drehimpuls-z-Komponente bleibt bei axialsymmetrischer Deformation erhalten), so kann man nur eine beschränkte Anzahl von Oszillatorzuständen $|njlm\rangle$ berücksichtigen, um die Dimension der zu diagonalisierenden Matrizen klein zu halten. Ein weiteres schwieriges Problem stellt die Wahl der Zweiteilchenwechselwirkung dar. Hierbei hegt man die Hoffnung, daß es keinen zu großen Unterschied ausmacht, anstatt der freien Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen, „effektive" Kräfte zu benutzen, die insbesondere keine hard-core-Singularität am Ursprung besitzen, sondern beispielsweise eine gaußische Radialabhängigkeit. Solche Potentiale können – wie in Kapitel IV bereits erwähnt – zwar durch spezielle Wahl der Austauschmischung bzw. über eine Impulsabhängigkeit Sättigungscharakter besitzen und selbst die niederenergetischen Streudaten wiedergeben. In den Rechnungen von DMP wird jedoch auf Sättigungseigenschaften verzichtet und lediglich der Einfluß der Reichweite und der Spinabhängigkeit auf die Deformation der Kerne untersucht. Dies hat eine Einschränkung der Selbstkonsistenz zur Folge, da man einen Zusammenbruch des Kerns nur dadurch verhindern kann, daß man der Oszillatorkonstante ω einen festen Wert gibt, der an den beobachteten Kernradius angepaßt wird (vgl. Kapitel III, Abschnitt 3).

„Nilsson-Rechnung". Um mit diesen Näherungen das oben skizzierte Programm zur Lösung von (VIII.1) durchführen zu können, hat man sich noch einen Satz von Parametern D, u, v zu beschaffen, mit dem man das Iterationsprogramm beginnt. Hierzu diagonalisiert man einen Nilsson-Hamiltonoperator H. Seine Matrixelemente lauten:

$$\langle k_1|H_0|k_2\rangle = \langle k_1|h_0|k_2\rangle + \langle k_1|V^{\text{sphär}} + \eta r^2 Y_2^0(\vartheta)|k_2\rangle. \qquad \text{(VIII.15)}$$

h_0 ist für leichte Kerne gegeben durch die kinetische Energie und einen phänomenologisch hinzugefügten Spin-Bahn-Term:

$$\langle k_1|h_0|k_2\rangle = t_{k_1k_2} + \langle k_1|a\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}|k_2\rangle. \qquad \text{(VIII.16)}$$

Für schwere Kerne ist aus den oben diskutierten rechentechnischen Gründen eine Beschränkung auf die in der Nähe der Fermikante befindlichen Konfigurationen nötig, d. h., man betrachtet nur die äußeren Nukleonen, die sich im Rahmen der „inert core"-Näherung in dem von den Rumpfnukleonen erzeugten mittleren Potential bewegen, das man zu h_0 hinzufügt:

$$\langle k_1|h_0|k_2\rangle = t_{k_1k_2} + V_{k_1k_2}. \qquad \text{(VIII.17)}$$

Der kugelsymmetrische Anteil $V^{\text{sphär}}$ des von den äußeren Nukleonen erzeugten mittleren Potentials bestimmt sich aus der Lösung von (VIII. 11) mit der kugelsymmetrischen Konfiguration

$$D_\nu^k = \delta_{\nu k} \qquad \text{(VIII. 18)}$$

und anschließendem Einsetzen der so gewonnenen Besetzungsparameter v^2 in das verallgemeinerte Hartree-Fock-Potential (VII. 87).

Der Winkelanteil von H_0 wird nach Nilsson durch $Y_2^0(\vartheta)$ beschrieben. Er ist proportional einem phänomenologischen Deformationsparameter η.

Mit dem Satz der D_ν^k, die man aus der Diagonalisation von H_0 gewinnt, berechnet man über die BCS-Gleichungen (VIII. 11) die Größen u_ν und v_ν. Da die D, u, v noch von η abhängen, bestimmt man durch Minimalisierung der Gesamtenergie

$$E = \langle \text{BCS}|H|\text{BCS}\rangle \qquad \text{(VIII. 19)}$$

einen Wert η_{min} aus:

$$E(\eta_{\text{min}}) = \text{abs. Min.} \qquad \text{(VIII. 20)}$$

Der zu diesem Wert von η gehörende Satz $D_\nu^k(\eta_{\text{min}})$, $u_\nu(\eta_{\text{min}})$, $v_\nu(\eta_{\text{min}})$ stellt den Ausgangspunkt für die Iteration dar, da man erwarten kann, daß er das System (VIII. 1) in guter Näherung erfüllt. Das Ergebnis der Iteration wird im folgenden in dem oben diskutierten Sinn als selbstkonsistente Rechnung bezeichnet (im Gegensatz zu der bei (VIII. 20) endenden „Nilsson-Rechnung").

3. *Ergebnisse*

„Nilsson-Rechnung". Fig. 41 zeigt das Ergebnis einer „Nilsson-Rechnung" im Massenbereich der seltenen Erden.

Als Zweiteilchenwechselwirkung wurde hierbei folgender Ansatz benutzt, der einen kurz- und langreichweitigen Anteil enthält (vgl. Abschnitt 1):

$$v(r_1 - r_2) = v_0\,\delta(r_1 - r_2) + f(|r_1 - r_2|)\,Y_2^0(\Theta_{12}). \qquad \text{(VIII. 21)}$$

Analoge Rechnungen wurden mit Rosenfeld- bzw. Serberkräften durchgeführt (siehe Kap. IV).

Es stellte sich dabei folgendes heraus:

a) Die Abhängigkeit der Gesamtenergie E von der Deformation und der Zahl der Nukleonen außerhalb des Rumpfes wird kaum von Spin-

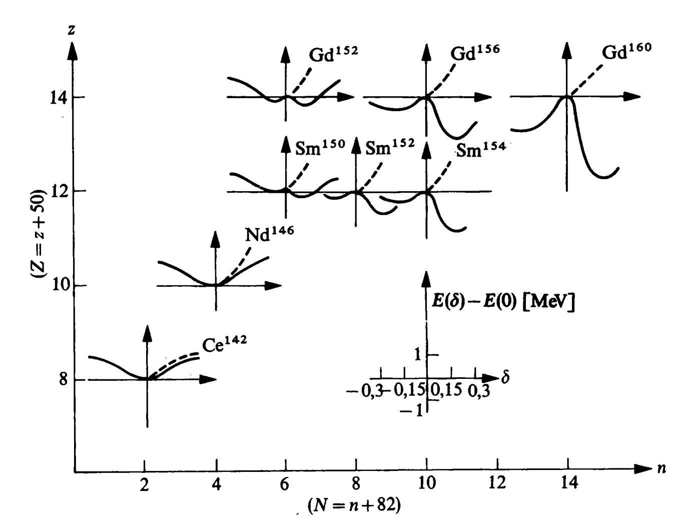


Fig. 41 Bindungsenergie als Funktion der Deformation im Bereich der seltenen Erden (δ + Quadrupol-Kraft) [DMP 66].

abhängigkeit bzw. Austauschcharakter der Kräfte beeinflußt, die Reichweite spielt jedoch eine große Rolle. Insbesondere führt z. B. die δ-Funktion als Grenzfall sehr kurzreichweitiger Kräfte zu überhaupt keiner Deformation (gestrichelte Kurven in Fig. 41).

b) In Übereinstimmung mit dem Experiment sind alle seltenen Erden zigarrenförmig ($\eta > 0$) deformiert. Dies liefert die Rechnung jedoch nur, falls die Schalenmodellparameter $\varepsilon_{k_1 k_2}$ zu einem Potential gehören, das einem Woods-Saxon-Potential hinreichend ähnlich ist oder allgemein ein Potential mit „steilen" Wänden darstellt (vgl. auch Lemmer und Weisskopf [LW 61]). Falls sie z. B. als Matrixelemente eines harmonischen Oszillators gewählt werden, erweisen sich die Grundzustandsdeformationen in der zweiten Hälfte der betrachteten Hauptschale für alle Kräfte als negativ.

Selbstkonsistente Rechnung. Da in die selbstkonsistente Rechnung kein Deformationsparameter mehr eingeht, wird als Maß für die Gleichgewichtsdeformation das innere Quadrupolmoment Q_0 benutzt:

$$Q_0 = \langle \mathrm{BCS} | \hat{Q}_{20} | \mathrm{BCS} \rangle, \qquad \text{(VIII.22)}$$

$$\hat{Q}_{20} = \sum_{njlm} \sum_{n'j'l'm'} \langle n l j m | r^2 Y_2^0 | n' l' j' m' \rangle a^\dagger_{nljm} a_{n'l'j'm'} . \qquad \text{(VIII.23)}$$

Als Funktion der Teilchenzahl sind in Fig. 42 selbstkonsistent berechnete und gemessene Werte von Q_0 angegeben. Hierbei ist der schnelle Anstieg von Q_0 in der Gruppe der Samarium-Isotope und der leichte Abfall zum Schalenabschluß hin richtig wiedergegeben. Die absolute Größe von Q_0 ergibt sich allerdings als um einen Faktor $\simeq 2$ zu klein. Dies begründet sich aus der Vernachlässigung der Rumpfnukleonen im Rahmen der „inert core"-Näherung, da hierbei der als kugelsymmetrisch angenommene starre Rumpf keinen Beitrag zum Quadrupolmoment liefern kann.

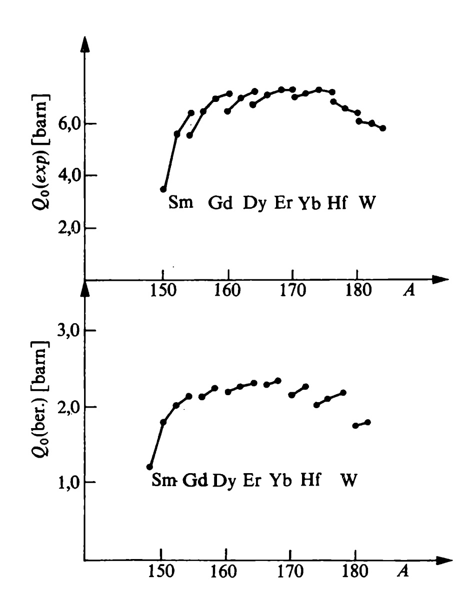


Fig. 42 Berechnete und experimentelle Quadrupolmomente im Bereich seltener Erden nach [DMP 66]. (Rosenfeld-Mischung, selbstkonsistente Rechnung).

In Fig. 43 sind die Ergebnisse einer „Nilsson-Rechnung" für Sm^{152} mit einer Rosenfeldmischung aufgetragen, die eine negative Deformation ergeben würden. Zum Vergleich sind die Werte der selbstkonsistenten Rechnung eingezeichnet, die das experimentell bestätigte positive Quadrupolmoment liefert.

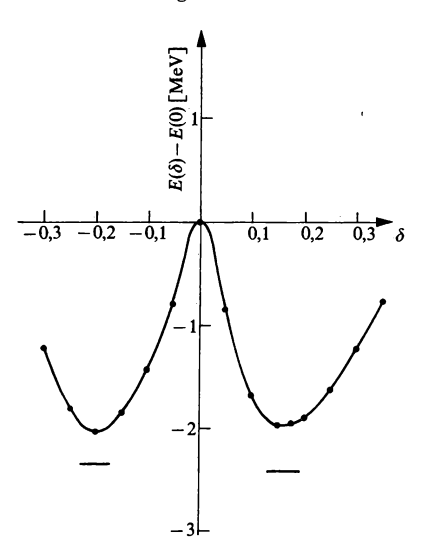


Fig. 43 Bindungsenergie als Funktion der Deformation für Sm^{152} (Rosenfeld-Kraft). Die Linien unterhalb der Minima beziehen sich auf die Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnung (nach [DMP 66]).

Im Gegensatz zu den seltenen Erden treten für $A > 24$ auch scheibenförmige Deformationen auf. Sie werden für Si^{28} und S^{32} durch die selbstkonsistente Rechnung reproduziert. Bei Mg^{24} und Mg^{26} liegen die durch eine „Nilsson-Rechnung" gelieferten Ergebnisse für positive und negative Deformation so dicht beisammen, daß eine Entscheidung, welcher

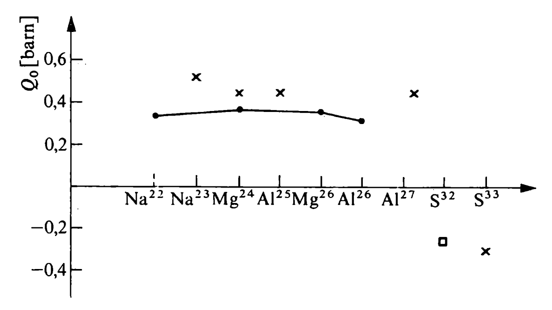


Fig. 44 Berechnete (○ □) und experimentelle (×) Werte für das innere Quadrupolmoment leichter deformierter Kerne (Serber-Kraft, selbstkonsistente Rechnung). (Nach [DMP 66].)

Wert genommen werden soll, nicht getroffen werden kann; die selbstkonsistente Rechnung liefert positive Deformation. In Fig. 44 sind die selbstkonsistent berechneten Quadrupolmomente mit den experimentellen Daten verglichen. Die gute Übereinstimmung ist auf die Berücksichtigung des Kernrumpfes zurückzuführen, der etwa 20 bis 35% zum gesamten Quadrupolmoment beiträgt. Dieser Wert wird von der Zahl der äußeren Nukleonen kaum beeinflußt. Auch der Einfluß von Tensorkräften auf die Deformation erweist sich als gering.

Es sei noch bemerkt, daß offenbar Paarkonfigurationen für leichte Kerne eine wesentlich geringere Rolle spielen als für mittelschwere und schwere Kerne. So hat die Gleichung (VIII.11) bei den leichten Kernen für eine Rosenfeldkraft nur die triviale Lösung $\Delta_{\nu-\nu}=0$ und auch eine Serberkraft liefert einen ziemlich kleinen Gap-Parameter.

Es stellt sich heraus, daß in der Nähe der Fermikante Nilsson- und selbstkonsistente Rechnung oft beträchtlich verschiedene Transformationskoeffizienten D_ν^k liefern, während sich für tieferliegende Niveaus nur geringfügige Unterschiede ergeben. Es wird also die Vermutung bestätigt, daß die inneren Zustände in guter Näherung Nilsson-Zustände sind.

Zusammenfassung. Die Ergebnisse, zu denen Dietrich, Mang und Pradal [DMP 66] kommen, können folgendermaßen zusammengefaßt werden:

a) Das Auftreten stark deformierter Kerne zwischen Schalenabschlüssen hängt empfindlich von der Reichweite der Nukleon-Nukleon-Kräfte und wenig von ihrer Spinabhängigkeit und vom Austauschcharakter ab.

b) Die Nilsson-Darstellung für das deformierte mittlere Feld liefert eine recht gute Näherung für die selbstkonsistenten Einteilchenzustände, vorausgesetzt der Einteilchenhamiltonoperator wird gemäß (VIII.15) definiert. Größere Abweichungen werden in der Nähe der Fermikante gefunden.

c) Paarkorrelationen sind für schwere Kerne wichtiger als für leichte.

d) Die Kopplung der Gleichungssysteme (VIII.11) und (VIII.13) kann in einer selbstkonsistenten Rechnung nicht vernachlässigt werden. Sie ist im wesentlichen durch die Abhängigkeit der Hartree-Fock-Matrix $\Gamma_{\nu_1\nu_2}^{\mathrm{BCS}}$ von den Besetzungswahrscheinlichkeiten gegeben.

IX. DAS TRÄGHEITSMOMENT VON ATOMKERNEN

1. Einleitung

Bei der Konstruktion des in Kapitel III besprochenen Rotationsmodells wird ein Parameter Θ eingeführt, den man in Analogie zur klassischen Mechanik als Trägheitsmoment bezeichnet. Er kann experimentell aus den Rotationsspektren

$$E_I - E_{I_0} = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\,[I(I+1) - I_0(I_0+1)] \tag{IX.1}$$

bestimmt werden. Wie in Kapitel III ausführlich besprochen, führte uns die Existenz solcher kollektiver Rotationszustände neben anderen Kriterien zur Annahme einer stabilen Deformation der Kerne in bestimmten Massenbereichen.

Ein Spektrum der Form (IX.1) läßt sich zwanglos erklären, indem man sich die Gesamtwellenfunktion Ψ^I_{MK} des A-Nukleonensystems denkt als ein Produkt aus einer Kreiselfunktion $D^I_{MK}(\vartheta)$ und einer „inneren" Funktion $\chi^{\tau}_K(\boldsymbol{q})$, welche das System im ruhenden Zustand beschreibt:

$$\Psi^I_{MK} \sim D^I_{MK}(\vartheta)\,\chi^{\tau}_K(\boldsymbol{q})\,. \tag{IX.2}$$

Dieser Aufspaltung der Gesamtwellenfunktion liegt eine Aufspaltung des Gesamthamiltonoperators zugrunde in einen inneren und in einen kollektiven Anteil sowie einen Rest, der die Wechselwirkung zwischen innerer und kollektiver Bewegung beschreibt (vgl. hierzu die Arbeiten von Villars [Vi (1,2) 57] und [Vi 58] und Lipkin [Li 59]):

$$H = H_{\text{in}}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) + H^0_{\text{rot}} + H_W(\boldsymbol{J},\vartheta,\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}), \tag{IX.3a}$$

mit

$$H^0_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\,\Theta(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})}\left(\boldsymbol{J}^2 - J_3^2\right). \tag{IX.3b}$$

Damit (IX.2) in guter Näherung Eigenfunktion zu (IX.3a, b) ist, darf H_W die innere und die kollektive Bewegung nur wenig koppeln und der Operator $\Theta(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ des Trägheitsmoments muß mit H_{in} vertauschen.

Stellt man $H_{\text{in}}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ ($\boldsymbol{p}$ sind die zu $\boldsymbol{q}$ konjugierten Impulse) wie üblich durch ein Nilsson-Modell mit Restwechselwirkung dar, so wird die

innere Bewegung durch die $3N$ Orts- und die $3N$ Impulskoordinaten beschrieben und die drei Eulerschen Winkel ϑ_i der Kreiselfunktion D^I_{MK} erweisen sich als überzählige Variable. Man könnte daran denken, zwar das Konzept (IX.3a, b) beizubehalten, jedoch die Eulerschen Winkel durch die $3N$ Ortskoordinaten auszudrücken und so die überzähligen Variablen zum Verschwinden zu bringen. Dieses Programm, das einer Bestimmung des Trägheitsmoments Θ entspräche, ist bislang nicht durchgeführt worden. Stattdessen kann man sich mit einem Modell behelfen, das allgemein als Kurbel- (oder cranking-) Modell bezeichnet wird. Wir werden außerdem im nächsten Kapitel sehen, daß sich die in diesem Modell hergeleitete Beziehung für das Trägheitsmoment unter gewissen Annahmen auch aus Variationsverfahren ergibt, in die keine überzähligen Variablen eingehen und die die Drehinvarianz des Gesamtsystems erhalten.

2. *Das Kurbelmodell nach Inglis*

Der anschauliche Inhalt dieses Modells läßt sich folgendermaßen formulieren. In einem ruhenden axialsymmetrischen Potential bewegen sich die Nukleonen unter dem Einfluß eventuell noch vorhandener Restwechselwirkungen. Die Rotationszustände, die auf den dadurch gegebenen inneren Zuständen (Grundzustand oder innere Anregungszustände) aufbauen, kann man sich dadurch erzeugt denken, daß man das Einteilchenpotential künstlich mit der Winkelgeschwindigkeit ω um eine senkrecht zur Symmetrieachse stehende Achse (z. B. die x-Achse) dreht.

Die Dichteänderung, die von dieser Drehung hervorgerufen wird,

$$\rho^0 \to \rho^0 + \rho^1 + \cdots, \qquad \text{(IX.4)}$$

berechnet sich im Rahmen der zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie. Um das Trägheitsmoment durch diese Dichteänderung ausdrücken zu können, stellt man in Analogie zur klassischen Mechanik entweder die Änderung des Drehimpulses oder der Energie durch das Trägheitsmoment Θ dar, wobei sich zeigen wird, daß beide Definitionen auf denselben Wert von Θ führen. Mit (A.III.19) folgt:

$$\langle J_x \rangle = \mathrm{Sp}(J_x \rho) = \mathrm{Sp}(J_x \rho^0) + \mathrm{Sp}(J_x \rho^1). \qquad \text{(IX.5)}$$

Der von der Drehung herrührende Anteil des Erwartungswertes von J_x lautet damit:

$$\omega\,\Theta_1 \equiv \mathrm{Sp}(\hbar J_x \rho) - \mathrm{Sp}(\hbar J_x \rho^0) = \mathrm{Sp}(\hbar J_x \rho^1). \qquad \text{(IX.6)}$$

Im folgenden wollen wir nur gg-Kerne im Grundzustand betrachten, für die gilt:

$$\mathrm{Sp}(J_x \rho^0) = 0. \tag{IX.7}$$

Um das Trägheitsmoment über die Rotationsenergie definieren zu können, muß man bedenken, daß die Entwicklung (IX.4) der Einteilchendichte eine Entwicklung nach Potenzen von ω darstellt:

$$\rho = \rho^0 + \rho^1 + \rho^2 + \cdots, \tag{IX.8a}$$

$$\rho^l \sim \omega^l. \tag{IX.8b}$$

Da jedoch die Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} \equiv \mathrm{Sp}(H\rho) - \mathrm{Sp}(H\rho^0) \tag{IX.9a}$$

nicht vom Drehsinn der Rotation abhängen darf, ist Θ_2 in niedrigster Ordnung gegeben durch:

$$E_{\text{rot}} = \frac{\Theta_2}{2}\,\omega^2 \equiv \mathrm{Sp}(H\rho^2). \tag{IX.9b}$$

Um die Äquivalenz von Θ_1 und Θ_2 zeigen zu können, benutzen wir ein zuerst von Gross [Gr 60] vorgeschlagenes Variationsverfahren, das den Erwartungswert von H unter der Nebenbedingung zu einem Minimum macht, daß der Erwartungswert von J_x einen vorgegebenen Wert annimmt:

$$\delta \frac{\langle \Psi | H - \omega J_x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \tag{IX.10}$$

Der Lagrangeparameter ω bedeutet die Winkelgeschwindigkeit, mit der das System gedreht wird.

Mit den Lösungen $\Psi(\omega)$ von (IX.10) kann man die Erwartungswerte von J_x und H bilden. Nimmt man an, daß man sie nach Potenzen von ω entwickeln kann, so folgt mit (IX.6) und (IX.9b):

$$\langle J_x \rangle_\omega = \langle J_x \rangle_0 + \omega\,\Theta_1 + \mathrm{O}(\omega^2), \tag{IX.11}$$

$$\langle H \rangle_\omega = \langle H \rangle_0 + \frac{\omega^2}{2}\,\Theta_2 + \mathrm{O}(\omega^4). \tag{IX.12}$$

Beschränkt man sich nur auf die Teilmenge von Lösungen $\Psi(\omega)$, die dadurch gegeben ist, daß in (IX.10) ω alle reellen Werte durchläuft, dann gilt mit (IX.10):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega'} \{ \langle H \rangle_{\omega'} - \omega \langle J_x \rangle_{\omega'} \}_{\omega = \omega'} = 0 \tag{IX.13}$$

oder

$$\frac{1}{\omega}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega} \langle H \rangle_\omega = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega} \langle J_x \rangle_\omega, \quad \text{für alle } \omega. \tag{IX.14}$$

Aus (IX.11) und (IX.12) ergibt sich:

$$\Theta_1 = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega}\langle J_x\rangle_\omega\right]_{\omega=0}, \tag{IX.15}$$

$$\Theta_2 = \lim_{\omega\to 0}\frac{1}{\omega}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega}\langle H\rangle_\omega. \tag{IX.16}$$

Mit (IX.14) folgt daraus:

$$\Theta \equiv \Theta_1 = \Theta_2. \tag{IX.17}$$

Damit liefern (IX.6) und (IX.9b) den bereits klassisch bekannten Zusammenhang zwischen Rotationsenergie und Drehimpuls:

$$E_{\mathrm{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\langle J_x\rangle^2. \tag{IX.18}$$

Um das Trägheitsmoment aus (IX.6) berechnen zu können, benutzen wir die im Kapitel VI, Abschnitt 7, abgeleitete Bewegungsgleichung für die Einteilchendichte:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho} = [H_{\mathrm{HF}}(\rho),\rho]. \tag{IX.19}$$

Transformieren wir die Dichte von den Koordinaten $\bar{x}$ des rotierenden Systems auf das Laborsystem

$$\rho(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\rho(\bar{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x} \tag{IX.20}$$

und bilden wir

$$\dot{\rho}(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\{\dot{\rho}(\bar{x}) + \mathrm{i}\,\omega[\rho(\bar{x}),J_x]\}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x}, \tag{IX.21}$$

so erhalten wir mit (IX.19):

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho}(\bar{x}) = [(H_{\mathrm{HF}}[\rho(\bar{x})] - \hbar\omega J_x),\rho(x)]. \tag{IX.22}$$

Für die stationären Lösungen der Bewegungsgleichung (IX.22) mit

$$\dot{\rho}(\bar{x}) = 0 \tag{IX.23a}$$

ergibt sich folgende Bedingungsgleichung:

$$[(H_{\mathrm{HF}}[\rho(\bar{x})] - \hbar\omega J_x),\rho(x)] = 0. \tag{IX.23b}$$

Kürzt man die Einteilchendichte $\rho(\bar{x})$ im rotierenden System mit $\bar{\rho}$ ab und entwickelt man $\bar{\rho}$ wie üblich,

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}^0 + \bar{\rho}^1 + \cdots, \tag{IX.24}$$

so erhält man aus (IX.23b) in niedrigster Ordnung mit

$$H_{\mathrm{HF}}(\bar{\rho}) = H_{\mathrm{HF}}(\bar{\rho}^0) + H^1(\bar{\rho}^1) \equiv \bar{H}^0_{\mathrm{HF}} + \bar{H}^1 \tag{IX.25}$$

die Beziehung

$$[\bar{H}^0_{\mathrm{HF}},\bar{\rho}^1] + [\bar{H}^1,\bar{\rho}^0] = [\hbar\omega J_x,\bar{\rho}^0]. \tag{IX.26}$$

Mit den Konventionen

$$\bar{H}^0_{\mathrm{HF}}|i\rangle = \varepsilon_i^0|i\rangle, \tag{IX.27}$$

$$J_x = \sum_{kl} \langle k|j_x|l\rangle\, a_k^\dagger a_l, \tag{IX.28}$$

und unter Vernachlässigung von H^1, d. h., der Rückkopplung der Drehung auf das selbstkonsistente Feld, können wir durch Bilden von Matrixelementen Gleichung (IX.26) nach $\bar{\rho}^1_{kl}$ auflösen:

$$\bar{\rho}^1_{kl} = \hbar\omega\, \frac{\langle k|J_x\bar{\rho}^0|l\rangle - \langle k|\bar{\rho}^0 J_x|l\rangle}{\varepsilon_k^0 - \varepsilon_l^0}. \tag{IX.29}$$

Mit (IX.6) läßt sich damit Θ angeben:

$$\Theta = \frac{\hbar}{\omega}\,\mathrm{Sp}(J_x\bar{\rho}^1) = \frac{\hbar}{\omega}\sum_{kl}\langle l|j_x|k\rangle\langle k|\bar{\rho}^1|l\rangle. \tag{IX.30}$$

Setzen wir (IX.29) ein

$$\Theta = \hbar^2 \sum_{kl}\frac{\langle l|j_x|k\rangle}{\varepsilon_k^0-\varepsilon_l^0}\sum_r\left[\langle k|j_x|r\rangle\langle r|\bar{\rho}^0|l\rangle - \langle k|\bar{\rho}^0|r\rangle\langle r|j_x|l\rangle\right] \tag{IX.31}$$

und benutzen wir die Basis, in der $\bar{\rho}^0$ diagonal ist:

$$\langle s|\bar{\rho}^0|t\rangle = \rho_s^0\,\delta_{st}, \tag{IX.32}$$

so erhalten wir schließlich die *Inglis-Formel* für das Trägheitsmoment der Atomkerne:

$$\Theta = 2\hbar^2 \sum_{m=A}^{\infty}\sum_{i=0}^{A}\frac{|\langle i|j_x|m\rangle|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_i}. \tag{IX.33}$$

Die Summe über die unbesetzten Niveaus $|m\rangle$ kann auch auf Niveaus unterhalb der Fermikante ausgedehnt werden, da sich hierbei jeweils die zwei Beiträge mit $|\langle i|j_x|j\rangle|^2$ und $|\langle j|j_x|i\rangle|^2$ wegen des verschiedenen Vorzeichens des dazugehörenden Nenners gegeneinander wegheben und die Diagonalelemente überhaupt verschwinden (der Zähler geht für $j=i$ quadratisch, der Nenner linear gegen Null).

Um die Größenordnung von Θ qualitativ abschätzen zu können, wollen wir (IX.33) für einen anisotropen harmonischen Oszillator (z-Achse sei Symmetrieachse) auswerten. Unter Vernachlässigung des Spins der Nukleonen müssen wir Matrixelemente von

$$l_x = y p_z - z p_y \tag{IX.34}$$

berechnen. Benutzen wir hierzu die Darstellung des harmonischen Oszillators durch Auf- und Absteigeoperatoren, so gilt:

$$\begin{aligned} \langle n_x+1|x|n_x\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_x}(n_x+1)}\,, \\ \langle n_x+1|p_x|n_x\rangle &= \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega_x}{2}(n_x+1)}\,. \end{aligned} \tag{IX.35}$$

Damit sind nur folgende Matrixelemente von l_x von Null verschieden:

$$\begin{aligned} \langle n_y+1\, n_z+1|y p_z - z p_y|n_y n_z\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} - \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}}\right)\sqrt{(n_y+1)(n_z+1)}\,, \\ \langle n_y-1\, n_z-1|y p_z - z p_y|n_y n_z\rangle &= -\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} - \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}}\right)\sqrt{n_y n_z}\,; \end{aligned} \tag{IX.36}$$

$$\begin{aligned} \langle n_y+1\, n_z-1|y p_z - z p_y|n_y n_z\rangle &= -\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} + \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}}\right)\sqrt{(n_y+1)n_z}\,, \\ \langle n_y-1\, n_z+1|y p_z - z p_y|n_y n_z\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_y}} + \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_z}}\right)\sqrt{n_y(n_z+1)}\,. \end{aligned} \tag{IX.37}$$

Die Matrixelemente (IX.36) gehören zu Übergängen zwischen zwei verschiedenen Schalen mit einem Energienenner $+\hbar(\omega_y+\omega_z)$, während solche der Art (IX.37) Übergängen in derselben Schale entsprechen mit Energiedifferenzen $+\hbar(\omega_y-\omega_z)$. Eingesetzt in (IX.33) und summiert über m, ergibt sich:

$$\Theta = \frac{\hbar}{2}\left[\frac{(\omega_z-\omega_y)^2}{\omega_y\omega_z(\omega_y+\omega_z)}\sum_{i=1}^{A}(n_y+n_z+1)_i + \frac{(\omega_y+\omega_z)^2}{\omega_y\omega_z(\omega_y-\omega_z)}\sum_{i=1}^{A}(n_z-n_y)_i\right], \tag{IX.38}$$

wobei der erste Term von (IX.36) herrührt, der zweite von (IX.37). Zur weiteren Auswertung von (IX.38) verwendet man folgende Relationen, die bereits in Kapitel III (vgl. III 28 b) benutzt wurden:

$$\overline{x^2} = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A}\langle x^2\rangle_i = \frac{1}{A}\frac{\hbar}{m\omega_x}N_x, \tag{IX.39a}$$

$$N_x = \sum_{i=1}^{A}(n_x+\tfrac{1}{2})_i. \tag{IX.39b}$$

Zusammen mit den entsprechenden Beziehungen für y und z schreibt sich (IX.39):

$$\overline{x^2} : \overline{y^2} : \overline{z^2} = \frac{N_x}{\omega_x} : \frac{N_y}{\omega_y} : \frac{N_z}{\omega_z}. \qquad \text{(IX.40)}$$

Wie in Kapitel III führen wir die Gleichheit von Dichte- und Potentialverteilung ein. Aus den Oszillatorwellenfunktionen liest man dann mit (IX.39) die entsprechende Bedingung ab:

$$\frac{1}{\omega_x} : \frac{1}{\omega_y} : \frac{1}{\omega_z} = N_x : N_y : N_z. \qquad \text{(IX.41a)}$$

Berücksichtigt man weiter die Inkompressibilität des Kerns

$$\omega_x \omega_y \omega_z = \omega_0^3, \qquad \text{(IX.41b)}$$

so lassen sich die Frequenzen ω durch die Größen N ausdrücken:

$$\omega_x = \frac{\omega_0 (N_x N_y N_z)^{1/3}}{N_x}, \qquad \omega_y = \cdots, \qquad \omega_z = \cdots. \qquad \text{(IX.42)}$$

Mit den Beziehungen (IX.39–42) läßt sich (IX.38) exakt umformen in (vgl. [Mo 58]):

$$\Theta = \hbar \left[\frac{1}{\omega_y} \sum_{i=1}^{A} \left(n_y + \frac{1}{2} \right)_i + \frac{1}{\omega_z} \sum_{i=1}^{A} \left(n_z + \frac{1}{2} \right)_i \right]. \qquad \text{(IX.43)}$$

Θ erweist sich so als identisch mit dem Wert, der sich bei starrer Rotation des Kerns um die x-Achse ergäbe:

$$\Theta_{\text{starr}} = m \sum_{i=1}^{A} (\langle y_i^2 \rangle + \langle z_i^2 \rangle) = \hbar \left(\frac{1}{\omega_y} N_y + \frac{1}{\omega_z} N_z \right). \qquad \text{(IX.44)}$$

Obwohl sich in dem zur Ableitung von (IX.33) benutzten Modell die Nukleonen unabhängig und frei in ihrem mittleren Potential bewegen, besitzt der Kern näherungsweise ein Trägheitsmoment, als ob die Teilchen fest an ihre mittleren Lagen gebunden seien. Lüders [Lü 60] hat gezeigt, daß dies im Grenzfall großer Nukleonenzahlen für jedes Modell mit unabhängigen Nukleonen gilt.

Experimentelle, aus den Energiedifferenzen zwischen Rotationszuständen entnommene Werte sind um einen Faktor 2 bis 3 kleiner als Θ_{starr}. Es wird sich im nächsten Abschnitt zeigen, daß diese Diskprepanz durch Berücksichtigung der Superfluidität des Kerns weitgehend beseitigt werden kann.

3. Kurbelmodell mit Paarung

Zur Berücksichtigung der Paarwechselwirkung bei der Berechnung des Trägheitsmoments bedienen wir uns einer Methode, die man auch als verallgemeinertes Hartree-Fock-Verfahren bezeichnet (Valatin [Va 61]). Hierbei erweitert man den Begriff der Einteilchendichte auf sogenannte anomale Dichten χ (siehe Anhang III). In einem zur Herleitung des üblichen zeitabhängigen Hartree-Fock-Verfahrens (Kapitel VI, Abschnitt 7) analogen Vorgehen [Va 61] läßt sich die Bewegungsgleichung für die verallgemeinerte Dichte $\mathscr{R}$ herleiten:

$$i\hbar\dot{\mathscr{R}}=[\mathscr{H},\mathscr{R}], \tag{IX.45a}$$

$$\mathscr{R}=\begin{pmatrix}\rho & \chi\\ -\chi^* & 1-\rho^*\end{pmatrix}, \tag{IX.45b}$$

$$\mathscr{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon(\rho) & -\Delta(\chi)\\ \Delta^*(\chi) & -\varepsilon^*(\rho)\end{pmatrix}, \tag{IX.45c}$$

$$\rho_{pq}=\langle 0|a_q^\dagger a_p|0\rangle, \tag{IX.45d}$$

$$\chi_{pq}=\langle 0|a_q a_p|0\rangle, \tag{IX.45e}$$

($|0\rangle$ ist der exakte Grundzustand),

$$\varepsilon_{pq}(\rho)=t_{pq}-\lambda\delta_{pq}+\sum_{rs}\bar{v}_{ps,qr}\rho_{rs}, \tag{IX.45f}$$

$$\Delta_{p-q}(\chi)=-\sum_{rs}\bar{v}_{p-q,rs}\chi_{sr}. \tag{IX.45g}$$

Die stationären Lösungen von (IX.45a) mit

$$\dot{\mathscr{R}}=0 \tag{IX.46}$$

führen auf die verallgemeinerten Hartree-Fock-Gleichungen:

$$[\mathscr{H}^0,\mathscr{R}^0]=0. \tag{IX.47}$$

mit

$$\mathscr{H}^0=\begin{pmatrix}\varepsilon & -\Delta\\ \Delta^* & -\varepsilon^*\end{pmatrix}, \tag{IX.48}$$

$$\mathscr{R}^0=\begin{pmatrix}\rho^0 & \chi^0\\ -\chi^{0*} & 1-\rho^{0*}\end{pmatrix}, \tag{IX.49}$$

$$\rho_{pq}^0 = \langle \text{BCS}|a_q^\dagger a_p|\text{BCS}\rangle = v_q^2\,\delta_{pq} \equiv \rho_q^0\,\delta_{pq}, \tag{IX.50}$$

$$\chi_{pq}^0 = \langle \text{BCS}|a_q a_p|\text{BCS}\rangle = u_q v_q \delta_{p-q} \equiv \chi_q^0\,\delta_{p-q}, \tag{IX.51}$$

$$\varepsilon_{pq} = \varepsilon_{pq}(\rho^0) = t_{pq} - \lambda\,\delta_{pq} + \sum_{rs} \bar{v}_{ps,qr}\,\rho_{rs}^0, \tag{IX.52}$$

$$\Delta_{p-q} = \Delta_{p-q}(\chi^0) = -\sum_{rs} \bar{v}_{p-q,rs}\,\chi_{sr}^0. \tag{IX.53}$$

Die Matrixgleichung (IX.47) ist identisch mit den Hartree-Fock-Bogolyubov-Gleichungen (VII.82), wie man durch Ausführen des Kommutators in (IX.47) leicht nachprüft, wobei z.B. das Matrixelement in der linken oberen Ecke die Form hat[1]:

$$\varepsilon\rho^0 + \Delta\chi^{0*} - \rho^0\varepsilon - \chi^0\Delta^* = 0. \tag{IX.55}$$

Mit der Relation

$$\begin{aligned}
\Delta_{-kl} &= -\sum_r \langle -kl|(K^\dagger K\bar{v}|r-r\rangle)u_r v_r \\
&= -\sum_r [(\langle -kl|K^\dagger)(K\bar{v}|r-r\rangle)]^* u_r v_r \\
&= -\sum_r \langle k-l|\bar{v}|-rr\rangle^* u_r v_r = -\Delta_{k-l}^*
\end{aligned} \tag{IX.56}$$

ergibt sich die Äquivalenz von (IX.55) und (VIII.13) (für das Rechnen mit dem Zeitspiegelungsoperator K vergleiche man z. B. Messiah [Me 61], S. 632 ff.). Das Matrixelement in der rechten oberen Ecke liefert eine Linearkombination aus den Beziehungen (IX.55) und (IX.67) und ist damit ebenfalls den HFB-Gleichungen äquivalent.

Das weitere Vorgehen ist dem in Abschnitt 2 beschriebenen völlig analog. Durch Transformation von (IX.45a) ins rotierende Bezugssystem (siehe Anhang IV) folgt für die stationären Lösungen:

$$[\bar{\mathscr{H}} - \hbar\omega\,\mathscr{L}, \bar{\mathscr{R}}] = 0, \tag{IX.57}$$

mit

$$\mathscr{L} = \begin{pmatrix} J_x & 0 \\ 0 & -J_x^* \end{pmatrix}. \tag{IX.58}$$

[1] Ein Operator A^* ist durch seine Matrixelemente definiert:

$$(A^*)_{kl} \equiv \langle k|A|l\rangle^*. \tag{IX.54}$$

Betrachtet man wieder die Änderung der verallgemeinerten Einteilchendichte in niedrigster Ordnung

$$\bar{\mathscr{R}} = \bar{\mathscr{R}}^0 + \bar{\mathscr{R}}^1 + \cdots, \tag{IX.59}$$

so erhält man mit (IX.57):

$$[\bar{\mathscr{H}}^0, \bar{\mathscr{R}}^1] + [\bar{\mathscr{H}}^1, \bar{\mathscr{R}}^0] = [\hbar\omega\, \mathscr{L}, \bar{\mathscr{R}}^0]; \tag{IX.60}$$

$$\bar{\mathscr{H}}^1 = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}^1 & -\bar{\Delta}^1 \\ \bar{\Delta}^{1*} & -\bar{\varepsilon}^{1*} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathscr{R}}^1 = \begin{pmatrix} \bar{\rho}^1 & \bar{\chi}^1 \\ -\bar{\chi}^{1*} & -\bar{\rho}^{1*} \end{pmatrix}, \tag{IX.61}$$

$$\bar{\varepsilon}^1_{pq} = \sum_{rs} (v_{ps,qr} - v_{ps,rq})\, \bar{\rho}^1_{rs}, \tag{IX.62}$$

$$\bar{\Delta}^1_{p-q} = -\sum_{rs} (v_{p-q,rs} - v_{p-q,sr})\, \bar{\chi}^1_{sr}. \tag{IX.63}$$

Unter Vernachlässigung der Rückwirkung der Drehung auf das selbstkonsistente Feld liefert das linke obere Matrixelement in (IX.60) die Beziehung:

$$\varepsilon\rho^1 - \rho^1\varepsilon + \Delta\chi^{1*} - \chi^1\Delta^* = \hbar\omega(J_x\rho^0 - \rho^0 J_x). \tag{IX.64}$$

Hier und im folgenden sind die Querstriche aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen. Alle Größen beziehen sich jedoch sinngemäß auf das körperfeste Bezugssystem.

Mit den Abkürzungen

$$\varepsilon_{pq} = \hat{\varepsilon}_p \delta_{pq}, \quad \hat{\varepsilon}_p = \hat{\varepsilon}_p^*, \tag{IX.65a}$$

$$\Delta_{pq} = \Delta_p \delta_{p-q} = -\Delta_q \delta_{p-q}, \quad \Delta_p \equiv \Delta_{p-p} = \Delta_p^* \tag{IX.65b}$$

lauten die Matrixelemente von (IX.64):

$$\hat{\varepsilon}_p \rho^1_{pq} - \rho^1_{pq}\hat{\varepsilon}_q + \Delta_p \chi^{1*}_{-pq} + \chi^1_{p-q}\Delta_q = \hbar\omega[(j_x)_{pq}\rho^0_q - \rho^0_p (j_x)_{pq}]. \tag{IX.66}$$

Um hieraus die Größe ρ^1_{pq} zu berechnen, die wir nach (IX.6) zur Bestimmung von Θ benötigen, müssen wir noch χ^1 durch ρ^1 ausdrücken. Unter der Annahme, daß die Projektionseigenschaft von $\mathscr{R}$ bei der Rotation erhalten bleibt, gilt (vgl. dazu Kap. VI, Abschn. 7):

$$\mathscr{R}^2 = \mathscr{R}. \tag{IX.67}$$

Setzt man die Entwicklung (IX.59) ein und vergleicht man Terme derselben Ordnung, so findet man z. B. für das Element der rechten oberen Ecke

$$\rho^0\chi^1 + \rho^1\chi^0 - \chi^0\rho^{1*} - \chi^1\rho^{0*} = 0 \tag{IX.68}$$

oder mit (IX.50), (IX.51) und (IX.71):

$$\rho_p^0 \chi_{p-q}^1 - \rho_{pq}^1 \chi_{-q}^0 - \chi_p^0 \rho_{-p-q}^{1*} - \chi_{p-q}^1 \rho_{-q}^0 = 0. \tag{IX.69}$$

Aufgelöst nach χ_{p-q}^1 folgt:

$$\chi_{p-q}^1 = \frac{\chi_{-q}^0 - \chi_p^0}{\rho_p^0 - \rho_{-q}^0} \rho_{pq}^1. \tag{IX.70a}$$

Ersetzt man in der zu (IX.70a) konjugiert komplexen Gleichung p durch $-p$ und q durch $-q$, so ergibt sich:

$$\chi_{-pq}^{1*} = \frac{\chi_q^0 - \chi_{-p}^0}{\rho_p^0 - \rho_q^0} \rho_{-p-q}^{1*}. \tag{IX.70b}$$

Setzt man (IX.70a) und (IX.70b) in (IX.66) ein, so hat man eine Gleichung von ρ_{pq}^1 allein gewonnen, wenn man noch die Beziehung

$$\rho_{pq}^1 = -\rho_{-p-q}^{1*} \tag{IX.71}$$

berücksichtigt, die man mit (VII.8b) in folgender Weise einsehen kann:

$$\begin{aligned}\rho_{pq}(\omega) &= {}^{\omega}\langle \mathrm{BCS}|a_{q,\omega}^{\dagger} a_{p,\omega}|\mathrm{BCS}\rangle^{\omega} \\ &= [({}^{\omega}\langle \mathrm{BCS}|K^{\dagger} K a_{q,\omega}^{\dagger} K^{\dagger})(K a_{p,\omega} K^{\dagger} K|\mathrm{BCS}\rangle^{\omega})]^* \\ &= [{}^{-\omega}\langle \mathrm{BCS}|a_{-q,-\omega}^{\dagger} a_{-p,-\omega}|\mathrm{BCS}\rangle^{-\omega}]^* = \rho_{-p-q}^*(-\omega).\end{aligned} \tag{IX.72}$$

Für ρ_{pq}^1 ergibt sich somit aus (IX.66):

$$\rho_{pq}^1 = \frac{(\rho_p^0 - \rho_q^0)^2}{(\rho_p^0 - \rho_q^0)(\hat{\varepsilon}_q - \hat{\varepsilon}_p) + (\Delta_p + \Delta_q)(\chi_p^0 + \chi_q^0)} \hbar\omega (j_x)_{pq}. \tag{IX.73}$$

Mit

$$\omega\Theta = \mathrm{Sp}(\hbar J_x \rho^1) \tag{IX.74}$$

schreibt sich dann Θ:

$$\Theta = \hbar^2 \sum_{pq} \frac{(\rho_p^0 - \rho_q^0)^2 |(j_x)_{pq}|^2}{(\rho_p^0 - \rho_q^0)(\hat{\varepsilon}_q - \hat{\varepsilon}_p) + (\Delta_p + \Delta_q)(\chi_p^0 + \chi_q^0)}. \tag{IX.75}$$

Drückt man Δ und $\hat{\varepsilon}$ unter Benutzung von (VII.92) und (VII.94b) durch v, u, e aus, so erhält man schließlich mit (IX.50), (IX.51) und (IX.65a,b):

$$\Theta = \hbar^2 \sum_{pq} \frac{(u_p v_q - u_q v_p)^2}{e_p + e_q} |(j_x)_{pq}|^2. \qquad \text{(IX.76)}$$

Der Ausdruck (IX.76) heißt auch Inglis-Formel mit Paarung.

4. Vergleich mit dem Experiment

Aus der Formel (IX.76) für Θ können wir bereits qualitativ ersehen, daß die Berücksichtigung von Paarkorrelationen den starren Wert von Θ erniedrigt, da sowohl die Zähler kleiner als auch die Nenner größer werden.

Griffin und Rich [GR 59] haben mit einer von Formel (IX.76) etwas abweichenden Beziehung die Trägheitsmomente für 26 gg-Kerne im Bereich der seltenen Erden berechnet und sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment gefunden (Tab. 8). Nilsson und Prior [NP 61] haben Θ im Bereich $150 < A < 190$ und $226 < A < 250$ nach (IX.76) bestimmt und fanden, daß die Werte systematisch etwa 15% unter den beobachteten liegen (Fig. 45).

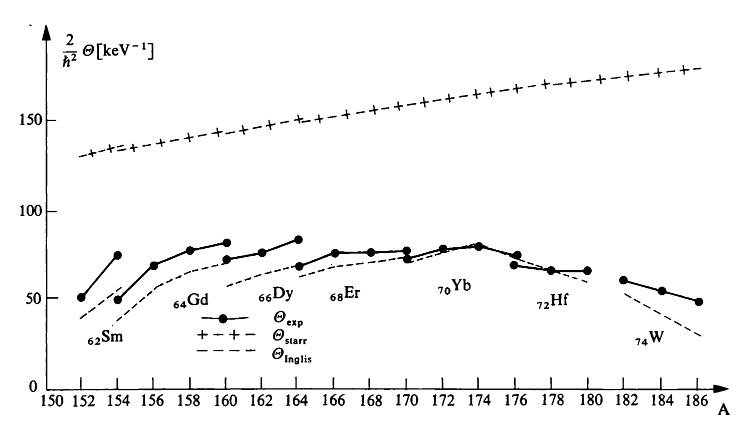


Fig. 45 Trägheitsmomente von gg-Kernen (nach [NP 61]).

Es zeigt sich also, daß die Übereinstimmung der berechneten Werte des Trägheitsmoments mit den beobachteten durch den Einschluß von Paarkorrelationen im Rahmen des Superflüssigkeitsmodells im Bereich der stabil deformierten Kerne wesentlich verbessert werden kann.

Tab. 8 Trägheitsmomente nach Inglis-Formel mit Paarung; E^{2+} = Energie des ersten (2^+) Rotationsniveaus (nach [GR 59]).

Kern	E^{2+}_{exp} [keV]	E^{2+}_{theo} [keV]	Fehler %
${}_{60}Nd^{150}_{90}$	130	139.5	+ 6.8
${}_{62}Sm^{152}_{90}$	122	123.0	+ 0.8
Sm^{154}_{92}	83	99.7	+16.7
${}_{64}Gd^{154}_{90}$	123	120.0	− 2.5
Gd^{156}_{92}	89	85.6	− 4.0
Gd^{158}_{94}	79	68.3	−15.7
Gd^{160}_{96}	76	66.1	−15.0
${}_{66}Dy^{160}_{94}$	86	92.1	+ 6.6
Dy^{162}_{96}	82	84.4	+ 2.8
Dy^{164}_{98}	73	70.0	− 4.3
${}_{68}Er^{164}_{96}$	90	88.3	− 1.9
Er^{166}_{98}	80	85.9	+ 6.9
Er^{168}_{100}	80	83.7	+ 4.4
Er^{170}_{102}	79	77.7	− 1.7
${}_{70}Yb^{170}_{100}$	84	86.1	+ 2.4
Yb^{172}_{102}	78	80.1	+ 2.6
Yb^{174}_{104}	76	77.1	+ 1.4
Yb^{176}_{106}	82	74.7	− 9.8
${}_{72}Hf^{176}_{104}$	89	83.8	− 6.2
Hf^{178}_{106}	91	78.5	−15.9
Hf^{180}_{108}	93	90.3	+ 3.0
${}_{74}W^{182}_{108}$	100	101.9	+ 1.9
W^{184}_{110}	112	110.9	− 1.0
W^{186}_{112}	124	118.3	− 4.8
${}_{76}Os^{186}_{110}$	137	130.9	− 4.8
${}_{76}Os^{188}_{112}$	155	166.8	+ 7.1

X. SYMMETRIEN UND INVARIANZEN

1. Einleitung

In unseren bisherigen Betrachtungen haben wir eine Einsicht in die Struktur der Atomkerne gewonnen, im wesentlichen gestützt auf eine Reihe von Modellen, die in sich und in ihren gegenseitigen Querverbindungen weitgehend konsistent sind und in ihrer Gesamtheit das experimentelle Datenmaterial recht gut reproduzieren. Bei ihrer Konstruktion waren wir – wann immer möglich – bestrebt, nicht nur phänomenologisch vorzugehen, sondern die notwendigen Näherungen, ausgehend vom exakten Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^{A} t_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ (j>i)}}^{A} v_{ij}, \tag{X.1}$$

zu begründen. Hierbei stellte es sich heraus, daß ein allen Modellen anhaftender Mangel in der Verletzung von *Symmetrien* bestand, deren Gültigkeit aus der Erfahrung bekannt ist. Wir wissen nämlich, daß neben der Energie eines Systems weitere Konstanten der Bewegung existieren, die in ihrer Gesamtheit den Zustand des Systems erst eindeutig festlegen. Wie schon früher erwähnt, sind dies insbesondere der Gesamtimpuls, der Gesamtdrehimpuls und die Teilchenzahl des Systems.

Wir konnten zwar in einzelnen Fällen Vorschriften angeben, wie die Verletzung von Symmetrien durch Rechentricks zu umgehen sei (vgl. z. B. (I. 5), (I. 7), (VI. 111), (VII. 140), ein allgemeines Rezept fehlt uns jedoch bislang.

In Abschnitt 2 wollen wir daher Verfahren besprechen, bei denen wir einerseits bei der Herleitung der Eigenschaften des betrachteten Kerns vom Hamiltonoperator (X. 1) ausgehen und andererseits die Invarianzforderungen berücksichtigen werden. Diese nach Vorschlägen von Peierls und Yoccoz [PY 57] sowie Zeh [Ze 65] entwickelten Methoden werden im 3. Abschnitt konkret auf Teilchenzahl, Translation und Rotation angewendet bzw. die in der Literatur bekannten numerischen Rechnungen zitiert.

In Abschnitt 4 wird ein von Thouless und Peierls [TP 62] stammendes Verfahren diskutiert, das die Symmetrien von einem etwas anderen Standpunkt aus in Ordnung bringt.

2. *Symmetrieerhaltende Variationsverfahren*

Allgemeines. Die bisher entwickelten Modellvorstellungen lassen sich fast ausschließlich auf Variationsverfahren zurückführen, bei denen aus einer bestimmten Klasse von Zustandsfunktionen die besten im Sinne eines Extremalprinzips ausgewählt werden:

$$\langle \delta \hat{\Psi} | H - E | \hat{\Psi} \rangle = 0. \tag{X.2a}$$

Sind in der benutzten Zustandsklasse Erhaltungssätze verletzt, wird man zunächst bestrebt sein, die Variation so vorzunehmen, daß wenigstens die Mittelwerte der zu den verletzten Invarianzen gehörenden Operatoren einen vorgegebenen festen Wert annehmen. Mathematisch wird eine solche zusätzliche Zwangsbedingung mit einem Lagrangeparameter an das Variationsprinzip angekoppelt; so erhält man etwa im Fall der Teilchenzahl:

$$\langle \delta \hat{\Psi} | H - E - \mu \hat{N} | \hat{\Psi} \rangle = 0. \tag{X.2b}$$

Ebenso kann man mit dem Drehimpuls J_x verfahren

$$\langle \delta \hat{\Psi} | H - E - \hbar \omega J_x | \hat{\Psi} \rangle = 0 \tag{X.2c}$$

und mit dem Gesamtimpuls $\boldsymbol{P}$ ($\boldsymbol{v}$ bedeutet die Geschwindigkeit des Schwerpunkts)

$$\langle \delta \hat{\Psi} | H - E - \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{P} | \hat{\Psi} \rangle = 0. \tag{X.2d}$$

Es muß betont werden, daß die Lösungen $|\hat{\Psi}\rangle$ von (X.2b, c, d) keineswegs Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{N}, J_x$ bzw. $\boldsymbol{P}$ sind, sondern um einen vorgebbaren Mittelwert schwanken, durch den die Lagrangeparameter μ, ω, $\boldsymbol{v}$ festgelegt werden.

In mathematischer Sprache ist es nun sehr leicht, Wege anzugeben, auf denen die Erhaltungssätze erfüllt werden können:

a) Man projiziere die Lösungen $|\hat{\Psi}\rangle$ von (X.2b, c, d) auf den jeweiligen Unterraum der Eigenfunktionen zum Impuls-, Drehimpuls- oder Teilchenzahloperator. Hierdurch erhält man zwar Zustände mit den gewünschten Eigenschaften, d. h. bei einer unitären Transformation mit einem der Symmetrieoperatoren (z. B. $\exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}/\hbar)$ für die Translation) ändert sich nur die Phase des Zustandes, jedoch verliert man unter Umständen die Extremaleigenschaft der Lösung.

b) Der Zustandsraum, in dem variiert wird, soll so beschaffen sein, daß die Testzustände bereits Eigenfunktionen zu denjenigen Operatoren sind, die den Konstanten der Bewegung entsprechen. So könnte man z. B. eine auf den Raum der Impulseigenzustände projizierte Slater-

determinante in der Variationsgleichung benutzen. Hierdurch wird der Zustandsraum zwar eingeschränkt; da man jedoch durch die Projektion eine bessere Anpassung der Testzustände an die exakte, die Invarianzen erfüllende Lösung erreicht, kann man hoffen, daß dieser Mangel hierdurch überkompensiert wird. Die Verfahren a) und b) sind in Worten sehr schnell ausgedrückt, in praxi aber mit einem relativ großen mathematischen Aufwand verbunden; dies soll im folgenden etwas erläutert werden.

Konstruktion der Projektionsoperatoren und modifiziertes Variationsverfahren. Für die beiden unter a) und b) skizzierten Methoden ist die Kenntnis der *Projektionsoperatoren* auf die betreffenden Unterräume von besonderer Wichtigkeit. Bevor wir jedoch die Form dieser Operatoren genauer untersuchen, sei darauf hingewiesen, daß für die Invarianz gegen Teilchenpermutationen (vgl. auch Kapitel IV) die Verfahren a) und b) seit langem explizit durchgeführt sind. In einem Fermisystem wie dem Kern muß nämlich der Gesamtzustand total antisymmetrisch gegen Teilchenpermutation sein, d. h., Eigenzustand zum Permutationsoperator mit Eigenwert -1. Hartree [Ha 28] bestimmte zuerst die bestmögliche Produktfunktion, die er dann antisymmetrisierte (Fall a), Fock [Fo 30] hingegen variierte die bereits antisymmetrisierte Produktfunktion (Slaterdeterminante) (Fall b).

Wir wollen nun beweisen, daß ein möglicher Ansatz für die Konstruktion eines invarianten Zustandes Ψ aus einem vorgegebenen nichtinvarianten Φ gegeben ist durch

$$\Psi = \int d\Omega\, f(\Omega)\, U_\Omega \Phi \equiv Q\Phi, \tag{X.3}$$

wenn man die Funktionen f in geeigneter Weise wählt. U_Ω ist hierbei der unitäre Operator, der die jeweilige Symmetrietransformation bewerkstelligt. Er vertauscht mit dem Hamiltonoperator

$$[U_\Omega, H] = 0 \tag{X.4}$$

und ist für die uns besonders interessierenden Fälle gegeben durch:

Translation:
$$U_{\boldsymbol{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}}, \quad \boldsymbol{P} = \sum_{i=1}^{A} \boldsymbol{p}_i, \tag{X.5a}$$

Rotation um eine feste Achse:

$$U_\varphi = e^{-i\varphi J_x}, \quad J_x = \sum_{i=1}^{A} j_x^{(i)}, \tag{X.5b}$$

Allgemeine Rotation: $$U_{\alpha,\beta,\gamma} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}. \tag{X.5c}$$

Für die Teilchenzahl kann man in analoger Weise einen Operator

$$U_\psi = e^{-i\psi\hat{N}} \tag{X.5d}$$

definieren. Die Variable Ω, über die in (X.3) integriert wird, ist also eine Zusammenfassung der in der Transformation auftretenden kollektiven Variablen, d.h. durch den Ansatz (X. 3) wird die Methode automatisch von überzähligen Freiheitsgraden befreit. (Leser, die an mathematischen Einzelheiten nicht interessiert sind, können die im Kleindruck enthaltene Herleitung der Funktionen f übergehen).

Die Vorschrift (X.3) zur Konstruktion von Zuständen Ψ, die die gewünschte Symmetrieeigenschaft besitzen, entspricht der Beschränkung auf einen ganz bestimmten Unterraum $\{\Psi\}_\Phi$ des Hilbertraums, der durch alle Wellenfunktionen Ψ festgelegt ist, die durch Variation der $f(\Omega)$ bei festgehaltenen Φ gebildet werden können. Um zu zeigen, daß man mit dem Ansatz (X.3) in diesem Unterraum simultan H und U_Ω diagonalisieren kann, genügt es zu verifizieren, daß der auf diesen Unterraum transformierte Hamiltonoperator $P_\Phi H P_\Phi$ mit U_Ω vertauscht (P_Φ sei der Projektionsoperator, der auf $\{\Psi\}_\Phi$ abbildet). Dazu stellen wir fest, daß ein in $\{\Psi\}_\Phi$ enthaltener Zustand Ψ_1 durch die Operation U_Ω nicht aus $\{\Psi\}_\Phi$ herausgedreht werden kann:

$$\begin{aligned} U_\Omega \Psi_1 &= U_\Omega \int d\Omega' f_1(\Omega') U_{\Omega'} \Phi = \int d\Omega' f_1(\Omega') U_{\Omega+\Omega'} \Phi \\ &= \int d\Omega' f_1(\Omega'-\Omega) U_{\Omega'} \Phi = \Psi_2 \in \{\Psi\}_\Phi . \end{aligned} \tag{X.6}$$

Zerlegen wir jetzt einen beliebigen Hilbertraumvektor φ in seine Komponenten innerhalb bzw. außerhalb $\{\Psi\}_\Phi$

$$\varphi = P_\Phi \varphi + \varphi' \tag{X.7}$$

mit

$$P_\Phi \varphi' = 0, \tag{X.8a}$$

so folgt wegen (X.6) und $(U_\Omega P_\Phi \varphi, \varphi') = 0$

$$P_\Phi U_\Omega \varphi' = 0 \tag{X.8b}$$

oder durch Anwendung des Operators $P_\Phi U_\Omega$ auf Gleichung (X.7):

$$P_\Phi U_\Omega \varphi = P_\Phi U_\Omega P_\Phi \varphi. \tag{X.9}$$

Wegen (X.6) gilt aber auch:

$$U_\Omega P_\Phi \varphi = P_\Phi U_\Omega P_\Phi \varphi. \tag{X.10}$$

Ein Vergleich mit (X.9) liefert die Beziehung

$$[P_\Phi U_\Omega]=0 \tag{X.11}$$

und mit (X.4) schließlich die gewünschte Vertauschungsrelation:

$$[P_\Phi H P_\Phi, U_\Omega]=0. \tag{X.12}$$

Damit ist (X.3) als ein Ansatz verifiziert, der eine näherungsweise Bestimmung der Eigenzustände von H ermöglicht unter gleichzeitiger Berücksichtigung aller Symmetrien des Systems. Wir haben dazu aus dem Unterraum $\{\Psi\}_\Phi$ solche Ψ auszuwählen, die gleichzeitig Eigenzustände zu $P_\Phi H P_\Phi$ und U_Ω sind. In praxi geschieht dies, indem wir den Erwartungswert der Energie in diesem Unterraum minimalisieren oder – was dasselbe ist – gleichzeitig $P_\Phi H P_\Phi$ und U_Ω diagonalisieren; dies ist wegen (X.12) möglich. Wir entwickeln dazu f nach einem vollständigen System:

$$f(\Omega)=\sum_n c_n g_n(\Omega). \tag{X.13}$$

Durch Einsetzen in (X.3) werden folgende Definitionen nahegelegt

$$\Psi=\sum_n c_n \int d\Omega\, g_n(\Omega)\, U_\Omega \Phi=\sum_n c_n \Psi_n. \tag{X.14}$$

Um den Hamiltonoperator H im Raum der Ψ zu diagonalisieren, setzen wir in

$$(H-E)\Psi=0 \tag{X.15}$$

diese Entwicklung ein

$$(H-E)\sum_n c_n \Psi_n=0 \tag{X.16}$$

und gewinnen die Säkulargleichung:

$$\sum_n [(\Psi_m, H\Psi_n)-E(\Psi_m,\Psi_n)]\, c_n=0. \tag{X.17}$$

Definieren wir eine Matrix B durch ihre Elemente (die Ψ_n bilden im allgemeinen kein Orthonormalsystem)

$$B_{mn}=(\Psi_m,\Psi_n), \tag{X.18}$$

so können wir (X.17) als Vektorgleichung schreiben

$$(H-EB)\underline{c}=0 \tag{X.19}$$

oder

$$(B^{-1}H-E)\underline{c}=0. \tag{X.20}$$

(X.20) ist die übliche Form der Säkulargleichung als Eigenwertgleichung. Unter Einführung eines dualen Raumes Ψ^n erhält man sofort diese Form:

$$\sum_n c_n[(\Psi^m, H\Psi_n)-E\,\delta_{mn}]=0. \tag{X.21}$$

Die Ψ^n genügen hierbei der Relation

$$(\Psi^m, \Psi_n) = \delta_{mn}. \tag{X.22}$$

(X.21) entspricht der Eigenwertgleichung:

$$\sum_n (\Psi^m, P_\Phi H P_\Phi \Psi_n) c_n = E c_m. \tag{X.23}$$

Wegen (X.12) kann man die Vektoren $\underline{c}$ so wählen, daß sie auch U_Ω diagonalisieren:

$$\sum_n (g_m, U_\Omega g_n) c_n = \lambda c_m. \tag{X.24}$$

Die Gleichungen (X.23), (X.24) bestimmen die Lösung Ψ bei vorgegebenem Φ, und wir haben die allgemeine Vorschrift für die Bestimmung des Projektionsoperators Q gefunden.

Zweckmäßigerweise wählt man für das vollständige System g_n die irreduziblen Darstellungen der jeweiligen Symmetriegruppe. In einigen einfachen Fällen, bei denen die Symmetriegruppe eindimensionale Darstellungen hat, vereinfacht sich die Lösung dieses Gleichungssystems insofern, als alle Koeffizienten c_n bis auf einen verschwinden. Dieser Sachverhalt ist bei Translation und bei Drehung um eine Achse gegeben, wo die eindimensionalen Darstellungen der Gruppen bereits Eigenfunktionen zum Gesamtimpuls und zur Gesamtdrehimpulskomponente in Richtung der Achse sind. Im Fall der Translation hat dann $f(\Omega)$ die Form

$$f(a) = c_1 e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p}}, \quad \boldsymbol{P}|\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}\rangle, \tag{X.25}$$

im Fall der Rotation um eine feste Achse

$$f(\varphi) = c_2 e^{i\varphi m}, \quad J_z|m\rangle = m|m\rangle. \tag{X.26}$$

Für die Teilchenzahl folgt analog hierzu:

$$f(\psi) = c_3 e^{i\psi N}, \quad \hat{N}|N\rangle = N|N\rangle. \tag{X.27}$$

Für eine beliebige Rotation hat man die Darstellungsmatrizen der allgemeinen Drehgruppe im dreidimensionalen Raum, die Kreiselfunktionen $D^I_{MK}(\alpha\beta\gamma)$ zu benutzen. Linearkombinationen dieser Funktionen bezüglich ihrer Abhängigkeit von K sind Eigenfunktionen zum Quadrat und zur z-Komponente des Gesamtdrehimpulses, so daß für f zu schreiben ist

$$f(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_K c^I_K D^I_{MK}(\alpha,\beta,\gamma), \quad J^2|IM\rangle = I(I+1)|IM\rangle. \tag{X.28}$$

Die Projektionsoperatoren Q_ε ($\varepsilon = \boldsymbol{p}; m; N$) auf Eigenzustände des Gesamtimpulses, einer Komponente des Gesamtdrehimpulses und der Teilchenzahl sind durch die Gleichungen (X.25) bis (X.27) zusammen mit (X.3) und (X.5a, b, d) gegeben.

Damit können wir auf den beiden in Abschnitt 2 skizzierten Wegen a) bzw. b) invariante Näherungslösungen Ψ ermitteln, wobei das Variationsverfahren mit projizierten Testfunktionen (Fall b) die Form hat:

$$\langle \delta\Phi | Q_\varepsilon^\dagger (H-E) Q_\varepsilon | \Phi \rangle = 0 . \tag{X.29}$$

Für die allgemeine Rotation haben wir im Fall b) sowohl den Zustand Φ selbst als auch die Koeffizienten c_K^I zu variieren:

$$\sum_{KK'} c_K^{I*} c_{K'}^I \langle \delta\Phi | Q_{MK}^{I\dagger} (H-E) Q_{MK'}^I | \Phi \rangle = 0 , \tag{X.30}$$

$$\sum_{K} c_K^I \langle \Phi | Q_{MK}^{I\dagger} (H-E) Q_{MK'}^I | \Phi \rangle = 0 . \tag{X.31}$$

(X.31) ist identisch mit (X.23) und stellt im Fall a) das Bestimmungssystem für die Koeffizienten c_K^I und damit für den Projektor Q dar.

Berücksichtigt man noch, daß die in (X.29) bis (X.31) auftretenden Projektoren

$$Q_\varepsilon = \int \mathrm{d}\Omega \, g_\varepsilon(\Omega) \, U_\Omega , \qquad (\varepsilon = \boldsymbol{p}; m; N), \tag{X.32}$$

$$Q_{MK}^I = \int \mathrm{d}\Omega \, D_{MK}^I(\Omega) \, U_\Omega \tag{X.33}$$

die Eigenschaften

$$Q_\varepsilon^\dagger Q_{\varepsilon'} = Q_\varepsilon \delta_{\varepsilon\varepsilon'} , \tag{X.34}$$

$$Q_{MK}^{I\dagger} Q_{M'K'}^{I'} = Q_{K'K}^{I'} \delta_{II'} \delta_{MM'} \tag{X.35}$$

besitzen, so erhalten wir mit (X.4) schließlich im Fall b) folgende Bestimmungsgleichungen für eine die Invarianzen erfüllende Näherungslösung der Schrödingergleichung:

$$\langle \delta\Phi | (H-E) Q_\varepsilon | \Phi \rangle = 0 , \tag{X.36}$$

$$\sum_{KK'} c_K^{I*} c_{K'}^I \langle \delta\Phi | (H-E) Q_{K'K}^I | \Phi \rangle = 0 , \tag{X.37}$$

$$\sum_{K} c_K^I \langle \Phi | (H-E) Q_{K'K}^I | \Phi \rangle = 0 \tag{X.38}$$

3. *Anwendung auf Teilchenzahl, Translation und Rotation*

Auf der Basis der Gleichungen (X.36) bis (X.38) sind eine Reihe von Rechnungen durchgeführt worden, die wir im folgenden besprechen wollen.

Teilchenzahl. Der Projektionsoperator auf Zustände mit fester Teilchenzahl ist nach dem obigen gegeben durch:

$$Q_N = c_3 \int \mathrm{d}\psi \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{N}-N)\psi}. \tag{X.39}$$

Da $\hat{N}$ nur ganzzahlige Eigenwerte N hat, kann man sich auf das Intervall $0 \leqslant \psi \leqslant 2\pi$ beschränken:

$$Q_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\psi \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{N}-N)\psi}. \tag{X.40}$$

Mit

$$z = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi} \tag{X.41}$$

folgt

$$Q_N = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint \mathrm{d}z \, z^{\hat{N}-N-1}, \tag{X.42}$$

wobei der Integrationsweg in der z-Ebene über eine geschlossene, den Ursprung einschließende Kurve verläuft.

In Tab. 9 (Mang et al. [Ma 65]) wird die sog. *PBCS-Methode*, bei der die BCS-Lösung auf feste Teilchenzahl projiziert wird (Fall a),

$$|\Psi_{\mathrm{PBCS}}\rangle = Q_N |\mathrm{BCS}\rangle \tag{X.43a}$$

$$|\Psi_{\mathrm{PBCS}}\rangle = \frac{\mathcal{N}}{2\pi \mathrm{i}} \oint \mathrm{d}z \, z^{-N-1} \prod_{\nu>0} (u_\nu + v_\nu z^2 a_\nu^\dagger a_{-\nu}^\dagger)|0\rangle_0 \tag{X.43b}$$

mit der *FBCS-Methode* verglichen, die der Lösung der Variationsgleichung

$$\delta \langle \mathrm{BCS}|(H-E) Q_N|\mathrm{BCS}\rangle = 0 \tag{X.44}$$

entspricht (Fall b), sowie mit der üblichen *BCS-Methode* mit unscharfer Teilchenzahl. Die FBCS-Methode liefert wie erwartet jeweils den tiefsten Wert für die Grundzustandsenergie. Für weitere Einzelheiten vergleiche man die Arbeiten von Dietrich et al. [DMP 64] und Mang et al. [Ma 66].

Tab. 9 Vergleich der Gesamtenergien (in Einheiten von $0{,}05\,\hbar\mathring{\omega}_0, \hbar\mathring{\omega}_0 = 41\,A^{-1/3}$ MeV) im FBCS- und PBCS-Verfahren (nach [Ma 65]).

Systeme mit gerader Protonenzahl (25 Niveaus außerhalb des ($Z = 76$)-Rumpfes)			
Z	$-E_{\mathrm{FBCS}}$	$E_{\mathrm{BCS}} - E_{\mathrm{FBCS}}$	$E_{\mathrm{PBCS}} - E_{\mathrm{FBCS}}$
88	277,0711	0,7998	0,0057
90	321,2267	1,0000	0,0836
92	364,6673	1,2108	0,1098
94	407,0065	1,2930	0,1546
96	448,3517	1,6747	0,2169
98	487,3604	1,4963	0,2534
100	524,8801	1,5038	0,2339
Systeme mit gerader Neutronenzahl (40 Niveaus außerhalb des ($N = 106$)-Rumpfes)			
N	$-E_{\mathrm{FBCS}}$	$E_{\mathrm{BCS}} - E_{\mathrm{FBCS}}$	$E_{\mathrm{PBCS}} - E_{\mathrm{FBCS}}$
132	650,0979	0,9840	0,0661
134	691,5384	1,0014	0,0714
136	732,4847	1,0472	0,0811
138	772,9128	1,270	0,0954
140	812,7555	1,2499	0,1116
142	851,8462	1,3937	0,1352
144	889,7387	1,3002	0,1589
146	926,7140	1,3044	0,2003
148	962,7512	1,4561	0,2692
150	997,2782	1,3624	0,3288
152	1030,802	1,728	0,443
154	1067,575	1,211	0,246
156	1091,6522	1,0947	0,779
158	1120,9400	0,9982	0,152

Translation. Im Fall der Translation sind wir in der Lage, mit Hilfe der *Galileiinvarianz* das Problem bedeutend zu vereinfachen. Zunächst schreibt sich der Projektionsoperator bis auf eine unwichtige Konstante:

$$Q_{\boldsymbol{p}} = \int \mathrm{d}^3 a \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{P} - \boldsymbol{p})} . \qquad (\mathrm{X.45})$$

Das Variationsprinzip (X.36) hat die Form:

$$\langle \delta \Phi | (H - E_p) Q_{\boldsymbol{p}} | \Phi \rangle = 0 . \qquad (\mathrm{X.46})$$

Transformieren wir vom ruhenden in das mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{p}/M$ (M = Gesamtmasse) gleichförmig bewegte Bezugssystem (Galileitransformation)

$$|\Phi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}|\Phi'\rangle, \qquad \boldsymbol{R} = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A} r_i, \tag{X.47}$$

($\boldsymbol{R}$ = Operator des Schwerpunktsortes), so lautet (X.46):

$$\langle\delta\Phi'|e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}(H-E_p)Q_p e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}|\Phi'\rangle = 0. \tag{X.48}$$

Mit (X.45) prüft man leicht die Beziehung:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}} Q_p e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}} = Q_0. \tag{X.49}$$

Damit und mit der für lokale Zweiteilchenkräfte gültigen Identität

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}} H e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}} = H + \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{P}}{M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} \tag{X.50}$$

folgt aus (X.48):

$$\langle\delta\Phi'|\left(H - E_p + \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{P}}{M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\right) Q_0|\Phi'\rangle = 0. \tag{X.51}$$

Da $Q_0|\Phi'\rangle$ ein Zustand mit $\boldsymbol{p}=0$ ist, verschwindet der Term $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{P}/M$ und das Variationsprinzip hat die Form:

$$\langle\delta\Phi'|\left(H - E_p + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\right) Q_0|\Phi'\rangle = 0. \tag{X.52}$$

Mit der Abkürzung

$$E_p - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} = E_0 \tag{X.53}$$

haben wir das Problem völlig auf die Lösung für $\boldsymbol{p}=0$ zurückgeführt. Aus (X.53) ergibt sich automatisch die richtige Abhängigkeit der Gesamtenergie vom Schwerpunktsimpuls:

$$E_p = E_0 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}. \tag{X.54}$$

Nennt man die Lösung von (X.52) $|\Phi_0'\rangle$, so lautet die dazugehörige Impulseigenfunktion mit Gesamtimpuls Null:

$$|\Psi_{\boldsymbol{p}=0}\rangle = Q_0|\Phi_0'\rangle. \tag{X.55}$$

Mit den Lösungen $|\Phi_p\rangle$ von (X.46) und mit (X.49) gewinnen wir schließlich die allgemeine Lösung in der Form:

$$|\Psi_p\rangle = Q_p|\Phi_p\rangle = Q_p e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}|\Phi'_0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}} Q_0|\Phi'_0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}|\Psi_{\boldsymbol{p}=0}\rangle. \quad (X.56)$$

Führt man die Variation in (X.52) mit einem Produktansatz für $|\Phi'\rangle$ durch, so findet man recht komplizierte, in ihrer Struktur den Hartree-Fock-Gleichungen ähnliche Bestimmungsgleichungen für die Einteilchenzustände (Rouhaninejad und Yoccoz [RY 66]).

Während die Methode b) (Variation projizierter Testfunktionen) also durch Ausnutzung der Galileiinvarianz die richtige Abhängigkeit der Gesamtenergie vom Schwerpunktsimpuls liefert, führt die von Peierls und Yoccoz [PY 57] vorgeschlagene Methode a), bei der nach der Variation projiziert wird,

$$|\Psi_p^{\text{P.Y.}}\rangle = Q_p|\text{HF}\rangle, \quad (X.57)$$

zwar näherungsweise auf die richtige Abhängigkeit vom Gesamtimpuls

$$E_p^{\text{P.Y.}} = E_{p=0} + C\cdot \boldsymbol{p}^2 + \mathrm{O}(p^4); \quad (X.58)$$

die Konstante $1/2C$ stimmt jedoch (wenn auch geringfügig) nicht mit der Gesamtmasse überein:

$$C \neq \frac{1}{2M}. \quad (X.59)$$

Rotation. Im Rahmen der Methode a) bestimmte Yoccoz [Yo 57] die Trägheitsmomente einer Reihe von seltenen Erden (Fig. 46), indem er die Gesamtenergie als Funktion des Drehimpulses berechnete. Der Projektionsoperator Q_m für die Rotation um eine feste Achse hat hierbei die Form:

$$Q_m = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, e^{-i(J_x - m)\varphi}. \quad (X.60)$$

Die führenden Terme in der Gesamtenergie ergeben sich dabei proportional zu m^2 (Rotation um eine feste Achse) bzw. $I(I+1)$ (Rotation um eine freie Achse):

$$E_I^{\text{P.Y.}} = E_{I=0} + C\,I(I+1) + \cdots. \quad (X.61)$$

Der Koeffizient, der bei diesen Ausdrücken steht, stellt in dieser Näherung das Trägheitsmoment dar. Der sich ergebende Ausdruck ist nicht identisch mit der *Inglis-Formel* (vgl. (IX.33)), die Übereinstimmung der be-

rechneten zu den experimentellen Werten ist aber verhältnismäßig gut (Fig. 46).

Die Methode b) ist sowohl von Zeh [Ze 65] als auch Rouhaninejad und Yoccoz [RY 66] auf die Rotation angewendet worden. Sie führt

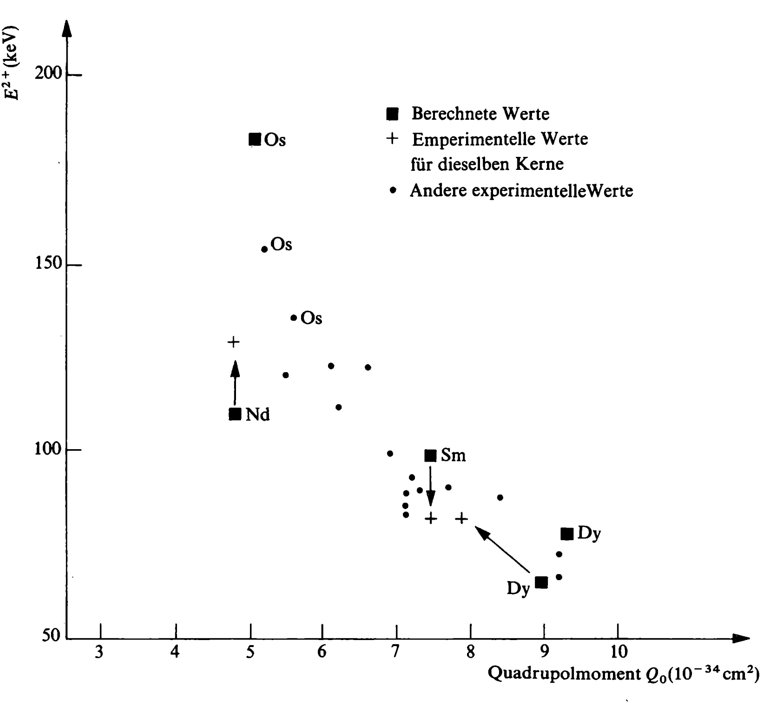


Fig. 46 Trägheitsmomente nach dem Peierls-Yoccoz-Verfahren [Yo 57].

hier zu außerordentlich komplizierten Gleichungen. In der Arbeit von Zeh wird gezeigt, daß sich unter gewissen vereinfachenden Annahmen in etwa die von Yoccoz (Fig. 46) berechneten Trägheitsmomente ergeben, während Rouhaninejad und Yoccoz für ${}_{68}\mathrm{Er}^{168}_{100}$ zwei Näherungswerte der Rotationskonstante $A = 1/2\Theta$ angeben:

$$A = 8\,\mathrm{keV},$$
$$A = 16\,\mathrm{keV}$$

(der experimentelle Wert liegt bei 13 keV).

4. Die Methode von Thouless und Peierls

Vorbemerkungen. Das allgemeine Variationsprinzip (X.36), (X.37), (X.38) führt auf Gleichungen sehr komplizierter Natur, deren Lösung bisher nur unter starken Vereinfachungen möglich war.

Wir wollen deshalb auf eine Methode bezugnehmen, die von Thouless und Peierls [TP 62] entwickelt wurde. Am Beispiel der zur Variationsgleichung (X.36) führenden Symmetriegruppen sei zunächst das Prinzip dieses Verfahrens erläutert, das dann auf Translation und Rotation explizit angewendet wird. Für die Teilchenzahl ist dieses Verfahren bislang nicht benutzt worden.

Herleitung der Grundgleichungen. Der erste Schritt hierbei besteht in der Bestimmung eines Satzes von Zustandsfunktionen $|\Phi_\lambda\rangle$, die man als Lösungen des folgenden Variationsprinzips angibt

$$\langle \delta\Phi_\lambda | H - E_\lambda - \lambda O | \Phi_\lambda \rangle = 0, \qquad \text{(X.62)}$$

wobei die Lösung $|\Phi_\lambda\rangle$ den Erwartungswert von H unter der Nebenbedingung minimal macht, daß der Erwartungswert des Operators O einen vorgegebenen festen Wert annimmt. $|\Phi_\lambda\rangle$ ist jedoch nicht Eigenfunktion zu O. λ und O haben in den interessierenden Fällen die Form:

$$\lambda = v, \hbar\omega, \mu; \qquad O = \boldsymbol{P}, \boldsymbol{J}, \hat{N}.$$

Die so bestimmten Lösungen überlagert man im zweiten Schritt mit einer Gewichtsfunktion $y(\lambda)$

$$\Phi = \int y(\lambda)\, \Phi_\lambda \, \mathrm{d}\lambda \qquad \text{(X.63)}$$

und variiert in (X.36) nur noch nach der Gewichtsfunktion $y(\lambda)$, was zu folgender Integralgleichung für $y(\lambda)$ führt:

$$\int y(\lambda) \left[h(\lambda', \lambda) - E n(\lambda', \lambda) \right] \mathrm{d}\lambda = 0, \quad \lambda' \text{ beliebig.} \qquad \text{(X.64)}$$

Die Größen $h(\lambda', \lambda)$, $n(\lambda', \lambda)$ entsprechen den Abkürzungen:

$$h(\lambda', \lambda) \equiv \langle \Phi_{\lambda'} | H Q_\varepsilon | \Phi_\lambda \rangle, \qquad \text{(X.65a)}$$

$$n(\lambda', \lambda) \equiv \langle \Phi_{\lambda'} | Q_\varepsilon | \Phi_\lambda \rangle. \qquad \text{(X.65b)}$$

Die zur Variation zugelassene Zustandsmenge erscheint dem Problem gut angepaßt, da Φ_λ den Erwartungswert $\langle H \rangle$ bereits minimalisiert und durch die gewichtete Überlagerung verschiedener Φ_λ im wesentlichen nur noch die Invarianzen des Systems in Ordnung gebracht werden müssen.

Translation. Wie wir bereits gesehen haben, kann man im Fall der Translation die Galileiinvarianz des Systems explizit ausnutzen, was zu folgender einfachen Form für Φ_v führt:

$$|\Phi_v\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} M\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}} |\Phi_0^{\mathrm{HF}}\rangle. \tag{X.66}$$

$|\Phi_0^{\mathrm{HF}}\rangle$ ist im einfachsten Fall die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen:

$$\langle \delta\Phi_0 | H - E_0 | \Phi_0 \rangle = 0. \tag{X.67}$$

Zur Herleitung der Bestimmungsgleichung für die Gewichtsfunktion $y(\boldsymbol{v})$ nutzen wir die Galileiinvarianz des Hamiltonoperators aus, indem wir in (X.65a,b) ebenso wie in (X.46) Q_p durch Q_0 ersetzen. Gehen wir dann mit (X.66) in (X.65a,b) ein, so erhalten wir schließlich folgende Integralgleichung für $y(\boldsymbol{v})$

$$\iint y(\boldsymbol{v})[h(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}) - E n(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v})]\, \mathrm{d}^3 v\, \mathrm{d}^3 a = 0 \tag{X.68}$$

mit den Abkürzungen:

$$h(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}) \equiv \int \overset{*}{\Phi}{}_0^{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} M\boldsymbol{v}'\cdot\boldsymbol{R}}\, H\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} M\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a})}\, \Phi_0^{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})\, \mathrm{d}^3 x, \tag{X.69a}$$

$$n(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}) \equiv \int \overset{*}{\Phi}{}_0^{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} M\boldsymbol{v}'\cdot\boldsymbol{R}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} M\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{a})}\, \Phi_0^{\mathrm{HF}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})\, \mathrm{d}^3 x. \tag{X.69b}$$

Diese Überlappintegrale lassen sich prinzipiell unter Kenntnis von $|\Phi_0^{\mathrm{HF}}\rangle$ berechnen. Das Verfahren vereinfacht sich jedoch beträchtlich, wenn man h und n durch einen Gauß-Ansatz approximiert. Für verschwindende Argumente gilt nämlich:

$$n(0,0,0) = \langle \mathrm{HF} | \mathrm{HF} \rangle = 1. \tag{X.70}$$

Mit zunehmenden Argumenten beginnt der Integrand zu oszillieren und n fällt ab. Im Fall von Boseteilchen, bei denen Φ_0 ein reines Produkt ist, läßt sich zeigen ([TP 62], Anhang), daß n sich für große Teilchenzahlen einer Gauß-Verteilung nähert.

Für Fermionen existiert zwar kein allgemeiner Beweis, doch kann z. B. Yoccoz [Yo 57] im Fall des Nilsson-Schalenmodells zeigen, daß der Gauß-Ansatz auch hier für große Kerne recht gut ist.
Wir setzen also an:

$$n(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}) = \exp\left[-\tfrac{1}{2} C_1 (\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')^2 - \mathrm{i} C_2\, \boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{v}'+\boldsymbol{v}) - \tfrac{1}{2} C_3 \boldsymbol{a}^2\right]. \tag{X.71}$$

Um diese Form begründen zu können, schreiben wir den Überlapp etwas um:

$$n(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2}(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{v}')\cdot\boldsymbol{a}}\, N(\boldsymbol{a},\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}'), \tag{X.72}$$

$$N(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}') \equiv \int \Phi_0^{*\mathrm{HF}}\,(\boldsymbol{x}+\tfrac{1}{2}\boldsymbol{a})\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}M\boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')}\ \Phi_0^{\mathrm{HF}}\,(\boldsymbol{x}-\tfrac{1}{2}\boldsymbol{a})\ \mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{X.73}$$

N ist invariant gegen eine Drehung im Ortsraum, kann also nur von solchen Kombinationen der Argumente abhängen, die invariant gegen Rotation sind, wie $(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')^2$, $(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')\cdot\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{a}^2$, wobei nur höchstens quadratische Ausdrücke berücksichtigt werden. Der Koeffizient von $(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')\cdot\boldsymbol{a}$ im Exponenten muß natürlich rein imaginär sein, um für alle Werte von $\boldsymbol{v}$ und $\boldsymbol{v}'$ ein exponentielles Anwachsen zu verhindern. Da außerdem aus (X.73) die Symmetrierelation

$$N(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}') = N^*(-\boldsymbol{a}, \boldsymbol{v}'-\boldsymbol{v}) \tag{X.74}$$

hervorgeht, muß dieser Koeffizient verschwinden und (X.71) ist begründet.

Der Energieüberlapp h stellt für verschwindende Argumente die Grundzustandsenergie E_0^{HF} dar:

$$h(0,0,0) = \langle \mathrm{HF}|H|\mathrm{HF}\rangle = E_0^{\mathrm{HF}}. \tag{X.75}$$

Für große Teilchenzahlen muß sich h ähnlich verhalten wie n, da der Operator H als Zweiteilchenoperator jeweils nur die Zustandsfunktionen zweier Teilchen verändert.

Folgender Ansatz ist drehinvariant:

$$\begin{aligned} h(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{v}', \boldsymbol{v}) = E_0^{\mathrm{HF}} \exp[&-\tfrac{1}{2}(C_1+\delta_1)(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}')^2 - \mathrm{i}(C_2+\delta_2)(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{v}')\cdot\boldsymbol{a} \\ &-\tfrac{1}{2}(C_3+\delta_3)\boldsymbol{a}^2 + \tfrac{1}{2}\delta_4(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{v}')^2]. \end{aligned} \tag{X.76}$$

Aufgrund des eben genannten Arguments sind die δ_i klein gegen die C_i. Allerdings verschwindet δ_4 nicht, da h für $\boldsymbol{R}=0$ nicht nur von $\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}'$ abhängt.

Die Koeffizienten C_i und δ_i sind mit Erwartungswerten bezüglich Φ_0^{HF} verknüpft. Diese Relationen gewinnt man, wenn man die zweiten Ableitungen von (X.71) und (X.76) einerseits und (X.69a, b) andererseits an der Stelle verschwindender Argumente vergleicht (die Größen R und P stehen hierbei für jeweils eine Komponente von $\boldsymbol{R}$ und $\boldsymbol{P}$):

$$\begin{aligned} \hbar^2 C_1 &= M^2\langle R^2\rangle, & E_0^{\mathrm{HF}}\hbar^2(C_1+\delta_1) &= \tfrac{1}{2}M^2[\langle R^2 H\rangle + \langle RHR\rangle], \\ \mathrm{i}\hbar^2 C_2 &= M\langle RP\rangle, & \mathrm{i}E_0^{\mathrm{HF}}\hbar^2(C_2+\delta_2) &= M\langle RHP\rangle, \\ \hbar^2 C_3 &= \langle P^2\rangle, & E_0^{\mathrm{HF}}\hbar^2(C_3+\delta_3) &= \langle P^2 H\rangle, \\ & & E_0^{\mathrm{HF}}\hbar^2\delta_4 &= \tfrac{1}{2}M^2[\langle RHR\rangle - \langle R^2 H\rangle]. \end{aligned} \tag{X.77}$$

Unter Ausnutzung einiger Identitäten, in deren Berechnung nur eingeht, daß Φ_0^{HF} invariant gegen Zeitspiegelung ist

$$\langle RP\rangle = \frac{\hbar}{2}\mathrm{i}, \quad \langle RHR\rangle = \langle R^2 H\rangle + \frac{\hbar^2}{2M}, \quad \langle RHP\rangle = \frac{\hbar}{2}\mathrm{i}E_0^{\mathrm{HF}} + \frac{\hbar}{2}\frac{\mathrm{i}}{M}\langle P^2\rangle, \tag{X.78}$$

erhält man schließlich:

$$C_2 = \frac{M}{2\hbar}, \qquad \hbar E_0^{\mathrm{HF}}\delta_2 = \frac{1}{2}\langle P^2\rangle, \qquad E_0^{\mathrm{HF}}\delta_4 = \frac{1}{4}M,$$
$$\hbar^2 E_0^{\mathrm{HF}}\delta_1 = \tfrac{1}{2}M^2[\langle R^2 H\rangle + \langle RHR\rangle - 2E_0^{\mathrm{HF}}\langle R^2\rangle], \tag{X.79}$$
$$\hbar^2 E_0^{\mathrm{HF}}\delta_3 = \langle P^2 H\rangle - E_0^{\mathrm{HF}}\langle P^2\rangle.$$

Mit (X.71) und (X.76) kann man nun eine einfache Lösung der Integralgleichung (X.68) finden, indem man für $y(\boldsymbol{v})$ ansetzt:

$$y(\boldsymbol{v}) = C\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\eta v^2}. \tag{X.80}$$

Mit diesem Ansatz kann man η aus (X.68) bestimmen und schließlich $E_0 = \langle\Phi|HQ_0|\Phi\rangle/\langle\Phi|Q_0|\Phi\rangle$ berechnen, wofür wir nach einigen Näherungen [TP62] finden:

$$E = E_0^{\mathrm{HF}} - \frac{3}{2}\frac{\delta_3}{C_3} + \frac{3}{2}\frac{(C_2^2/C_3^2)\delta_3 - \delta_4 - \delta_1}{\eta + C_1 + C_2^2/C_3}. \tag{X.81}$$

Wir haben also mit unserer Methode eine translationsinvariante Grundzustandswellenfunktion mit Impulseigenwert $\boldsymbol{p}$ konstruieren können

$$\langle x|\Psi_{\boldsymbol{p}}\rangle = \langle x|Q_{\boldsymbol{p}}|\Phi\rangle = \int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}}\, y(\boldsymbol{v})\,\Phi_{\boldsymbol{v}}(x-\boldsymbol{a})\,\mathrm{d}^3v\,\mathrm{d}^3a,$$

welche die von der Galileiinvarianz des Systems geforderte richtige Abhängigkeit $\boldsymbol{p}^2/2M$ der Energie vom Gesamtimpuls liefert. Außerdem finden sich impulsunabhängige Zusatzglieder zur Hartree-Fock-Grundzustandsenergie, welche die geisterhafte Nullpunktsbewegung des Schwerpunkts in der Schalenmodellnäherung wenigstens näherungsweise kompensieren.

Rotation. Im Fall der Drehung um eine feste Achse, z. B. die x-Achse, haben wir ein ganz ähnliches Problem wie bei der Translation zu untersuchen, mit dem Unterschied, daß hier ein der Galileiinvarianz analoges Prinzip fehlt, da bei der Drehung Trägheitskräfte auftreten, durch die das gedrehte Bezugssystem ausgezeichnet wird.

Bezeichnet man den Eigenwert von J_x mit m, so folgt mit (X.68) und (X.69) wieder eine Integralgleichung für $y(\omega)$:

$$\int_0^\infty d\omega\, y(\omega) \int_0^{2\pi} d\vartheta\, e^{im\vartheta} [h(\vartheta,\omega',\omega) - E n(\vartheta,\omega',\omega)] = 0 \tag{X.82}$$

mit

$$h(\vartheta,\omega',\omega) = \langle \Phi_{\omega'} | H\, e^{-iJ_x\vartheta} | \Phi_\omega \rangle, \tag{X.83a}$$

$$n(\vartheta,\omega',\omega) = \langle \Phi_{\omega'} | e^{-iJ_x\vartheta} | \Phi_\omega \rangle. \tag{X.83b}$$

Ersetzt man in ähnlicher Weise wie oben die Überlappfunktionen (X.83a, b) durch Gauß-Formen, dann kann man $y(\omega)$ wieder als Gauß-Funktion ansetzen:

$$y(\omega) = C' e^{-\frac{1}{2}\eta'(\omega - \Omega_m)^2}. \tag{X.84}$$

Eine längere Zwischenrechnung (siehe [TP 62]) liefert

$$\Omega_m = \frac{m}{\Theta} \tag{X.85}$$

und

$$E = E(m=0) + \frac{m^2}{2\Theta} + \cdots, \tag{X.86}$$

wobei Θ durch den vom Kurbelmodell gelieferten Ausdruck gegeben ist.

Im Falle beliebiger Rotationen eines axialsymmetrischen Systems sind die Verhältnisse ungleich komplizierter. Wir wollen der Vollständigkeit halber die entsprechenden Grundgleichungen angeben. Eine zum Gesamtdrehimpuls I und zur z-Komponente M gehörende Testwellenfunktion lautet hier:

$$|\Psi^{IM}\rangle = \sum_K \int_0^\infty d^3\omega\, y_K^I(\omega) \int_0^\pi \sin\alpha\, d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma\, D_{MK}^I(\alpha,\beta,\gamma)\, U_{\alpha,\beta,\gamma} | \Phi_\omega \rangle. \tag{X.87}$$

Die Integralgleichung zur Bestimmung der $y_K^I(\omega)$ folgt wieder aus (X.68):

$$\sum_K \int_0^\infty d^3\omega\, y_K^I(\omega) \int d\Omega\, D_{MK}^I(\Omega) [h(\Omega,\omega',\omega) - E n(\Omega,\omega',\omega)] = 0 \tag{X.88}$$

mit den Integralkernen

$$h(\Omega,\omega',\omega) = \langle \Phi_{\omega'} | H\, U_\Omega | \Phi_\omega \rangle, \tag{X.89a}$$

$$n(\Omega,\omega',\omega) = \langle \Phi_{\omega'} | U_\Omega | \Phi_\omega \rangle. \tag{X.89b}$$

Der Ansatz (X.87) für $|\Psi^{IM}\rangle$ ist noch allgemeiner als der Ansatz, welcher zu den Variationsgleichungen (X.37) und (X.38) führt. Dieser ist in

(X.87) enthalten, wenn man folgende Separation annimmt:

$$y_K^I(\omega) = c_K^I\, y(\omega). \tag{X.90}$$

Eine allgemeine Lösung von (X.88) und (X.89a, b) fehlt bislang. Thouless und Peierls [TP 62] konnten lediglich zeigen, daß im Grenzfall starker Deformationen in niedrigster Näherung wiederum folgende Abhängigkeit der Energie vom Drehimpuls vorliegt

$$E_I = \frac{\hbar^2 I(I+1)}{2\Theta}, \tag{X.91}$$

wobei Θ sich wie in (X.86) nach der Inglisformel berechnet.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß gegenwärtig zwar eine Lösung der Grundgleichungen in voller Allgemeinheit noch nicht möglich ist, daß jedoch die geschilderten Methoden den Weg zur Berücksichtigung von Invarianzeigenschaften eines A-Nukleonensystems dargelegt haben.

XI. DAS OPTISCHE MODELL

1. Einleitung und experimenteller Überblick

Anders als in allen bisherigen Kapiteln, wo wir uns vorwiegend mit der Bestimmung der gebundenen Zustände des Atomkerns befaßten, wollen wir uns nun mit einigen Grundzügen der einfachsten Kernreaktionen, wie z. B. der elastischen Nukleonenstreuung, befassen.

Analog zum Schalenmodell für gebundene Zustände werden wir hoffen, auch bei Reaktionen die Wechselwirkung der Streuteilchen mit den A Nukleonen des Kerns in einfachster Näherung durch ein mittleres Potential beschreiben zu können. Während des Aufenthalts am Kernort wird das Streuteilchen dann eventuell in einen ungebundenen Zustand dieses *optischen Potentials* „eingefangen". Ein solcher Resonanzzustand zerfällt natürlich, da er negative Bindungsenergie hat, nach kürzerer oder längerer Zeit und das eingefangene Teilchen verläßt den Kern wieder. Diese Zustände haben je nach Zerfallsrate eine größere oder kleinere Breite Γ, und wir werden in Abschnitt 2 einen analytischen Ausdruck für diese Breiten von ungebundenen Schalenmodellzuständen angeben. Neben der oben geschilderten Zerfallsmöglichkeit eines instabilen Anregungszustandes des $(A+1)$-Systems im Schalenmodell gibt es über die Restwechselwirkung des eingefangenen Teilchens mit den übrigen Nukleonen noch viele andere Zerfallskanäle. Das ankommende Nukleon wird dabei zunächst seine Energie gleichmäßig auf alle übrigen verteilen (der Kern wird „aufgeheizt"), wobei dann nach einiger Zeit aufgrund der statistischen Fluktuationen ein Teilchen „abgedampft" werden kann und der Kern im Grundzustand (elastischer Kanal) oder in einem angeregten Zustand (inelastischer Kanal) zurückbleibt; der angeregte Kern kann dann über γ-Strahlung oder, wenn noch genügend Energie vorhanden ist, unter Abdampfen eines zweiten Teilchens in den Grundzustand zurückkehren. Diese Liste der Zerfallskanäle ließe sich noch differenzieren und erweitern und hängt im Einzelfall vom betrachteten System ab. Die zuletzt beschriebenen Reaktionen, bei denen die emittierten Nukleonen außer den Erhaltungssätzen nichts mehr von der Vorgeschichte des einfallenden Teilchens „wissen", werden als Compoundkernreaktionen bezeichnet. Die Möglichkeit des Einteilchenzustandes, in Zustände des Compoundkerns zu zerfallen, führt

zu einer weiteren Verbreiterung des Einteilchenniveaus. Nennen wir diesen Beitrag $2W$, so ist die Gesamtbreite durch $\Gamma + 2W$ gegeben. Die Breite $2W$ kann in einem Modell sich unabhängig bewegender Teilchen zunächst nicht angegeben werden, da sie über die gegenseitige Wechselwirkung der Teilchen auf reinen Mehrteilcheneffekten beruht. Wir werden jedoch sehen, daß wir zu annähernd richtigen Ergebnissen kommen, wenn wir zu dem reellen Schalenmodellpotential $V(r)$ einen Imaginärteil i $W(r)$ hinzufügen. Ein solches komplexes Potential nennt man optisches Potential in Analogie zu einer trüben Glaskugel, bei der ein Teil des ankommenden Lichtstrahls absorbiert wird. Der aufgrund der inelastischen Compundkernreaktionen gegenüber dem Eingangsteilchenstrom geschwächte Teilchenstrom des elastischen Ausgangskanals kann nämlich formal auch als teilweise Absorption der einfallenden Teilchen gedeutet werden.

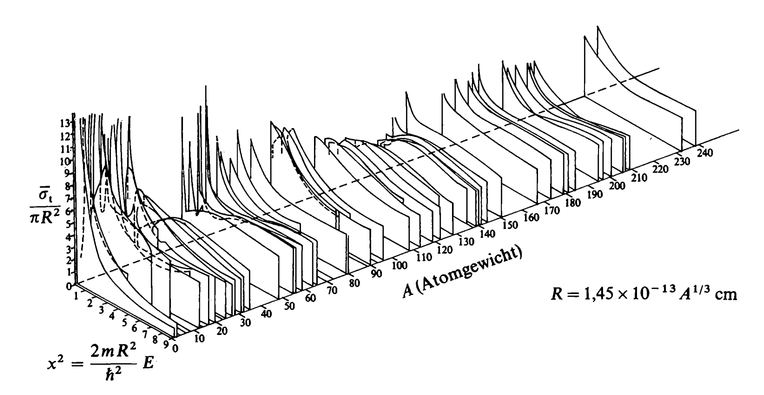


Fig. 47 Experimentelle Neutronenwirkungsquerschnitte als Funktion von Energie und Massenzahl (nach [Fe 54]).

Die experimentelle Situation ist kurz dadurch gekennzeichnet, daß im elastischen Wirkungsquerschnitt große Resonanzmaxima mit einer Breite von 1 – 2 MeV auftreten, deren Lage und Stärke von Kern zu Kern nur schwach variieren (siehe Fig. 47). Verwendet man Streuteilchen sehr niedriger Energie und arbeitet man mit hoher Energieauflösung, so stellt man fest, daß diese Resonanzen eine Feinstruktur von sehr vielen ($\simeq 10^4$ bis 10^6/MeV) und sehr schmalen (Breite $\simeq 1$ eV) Linien besitzen (Fig. 48). Die Erklärung dieses Sachverhalts wird uns in Abschnitt 3 beschäftigen.

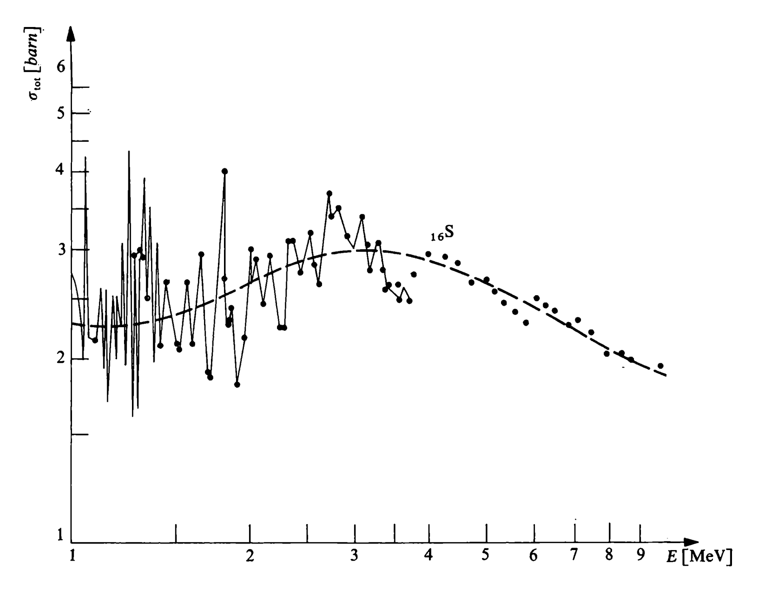


Fig. 48 Totaler Wirkungsquerschnitt von Schwefel. Gestrichelt der über die Compoundresonanzen gemittelte totale Wirkungsquerschnitt ([He 61], S. 659).

2. Einteilchenresonanzen im optischen Potential

Halbklassische Betrachtungsweise. Wir beschreiben hierzu die Welle des Streuteilchens innerhalb und außerhalb des Kerns durch zwei Wellenzahlen k bzw. k_0 mit

$$k_0 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\varepsilon}, \tag{XI.1}$$

$$k \equiv k_0 + k_1 - \frac{i}{2}K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(\varepsilon + V)}, \tag{XI.2}$$

d.h., der Atomkern wird in Analogie zur Optik als ein Medium mit Brechungsindex

$$n = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{\varepsilon + V}{\varepsilon}} = 1 + \frac{k_1}{k_0} - \mathrm{i}\frac{K}{2k_0} \tag{XI.3}$$

angesehen, wobei alle inelastischen Prozesse durch einen Imaginärteil von n (und damit von V) pauschal berücksichtigt werden. Spalten wir das Potential V in Real- und Imaginärteil auf

$$V = U + \mathrm{i}W, \qquad (U, W < 0) \tag{XI.4}$$

und berücksichtigen, daß für hohe Energien

$$n^2 - 1 \simeq 2(n-1), \qquad (1 - n \ll 1) \tag{XI.5}$$

gilt, so folgt aus (XI.3) mit

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} \tag{XI.6}$$

für die einzelnen Anteile von V:

$$U = \hbar v k_1, \qquad (k_1 < 0), \tag{XI.7}$$

$$W = -\frac{\hbar}{2} v K, \qquad (K > 0). \tag{XI.8}$$

Nach (XI.3) ist die Wellenfunktion des Neutrons im Kerninnern gegeben durch:

$$\psi_{(\mathrm{i})} \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}nk_0 z} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0 + k_1)z}\, \mathrm{e}^{-\frac{K}{2}z}. \tag{XI.9}$$

Wegen

$$|\psi_{(\mathrm{i})}|^2 \sim \mathrm{e}^{-Kz} \tag{XI.10}$$

ist also K nichts anderes als die reziproke mittlere freie Weglänge λ des Neutrons in der durch das komplexe Potential V beschriebenen Kernmaterie. Nützt man noch die klassische Beziehung zwischen mittlerer freier Weglänge λ einerseits und Dichte ρ eines Mediums sowie mittlerem Stoßquerschnitt $\bar{\sigma}$ andererseits aus

$$\lambda = (\rho \bar{\sigma})^{-1}, \tag{XI.11}$$

so folgt mit (XI.6–8) der einfachste Ausdruck für das imaginäre Potential:

$$W = -\tfrac{1}{2}\hbar v \rho \bar{\sigma}. \tag{XI.12}$$

Es ist aufschlußreich, sich die Kontinuitätsgleichung für die Dichte der Streuteilchen aufzuschreiben. Aus

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U + \mathrm{i}W \right) \psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{XI.13}$$

folgt in der üblichen Weise:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2+\operatorname{div}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\frac{2}{\hbar}W|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2, \tag{XI.14}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\limits_B|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3r+\int\limits_S j_n(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}f=-\frac{2}{\hbar}|W|\int\limits_B|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3r, \tag{XI.15}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)[\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)]-[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)]\psi(\boldsymbol{r},t)\}. \tag{XI.16}$$

Die Gleichungen (XI. 14–15) stellen Kontinuitätsgleichungen für ein Gebiet mit Senken dar, d. h. durch das imaginäre Potential werden gerade die aus dem elastischen Kanal herausgestreuten Anteile des Einfallstrahls beschrieben.

Resonanzen in einem Einteilchenpotential. Um die in Abschnitt 1 skizzierte experimentelle Situation quantitativ fassen zu können, beschreiben wir im folgenden die Streuung von Nukleonen an einem Potential endlicher Reichweite im Rahmen eines von Kapur und Peierls [KP 38] entwickelten Dispersionsformalismus, wobei wir uns eng an die von Brown [Br 59, 64] angegebene Formulierung halten. Aus Einfachheitsgründen beschränken wir uns im folgenden auf die s-Streuung von Neutronen mit Spin 0, d. h. wir lassen höhere Drehimpulsbeiträge als die für $l=0$ weg, behandeln keine Coulombeffekte und nehmen die Streuteilchen als unterscheidbar zu den Targetteilchen an. Verallgemeinerungen dieser Annahmen sind in [Br 59] zu finden. Für ein kugelsymmetrisches Einteilchenpotential (zunächst sei nur der Realteil berücksichtigt) haben wir dann folgende Einteilchenschrödingergleichung zu lösen:

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\varepsilon-U(r)\right\}\varphi(r)=0, \tag{XI.17}$$

$$\varphi(r)=r\psi(r). \tag{XI.18}$$

Außerhalb des Potentialbereichs ($U(r>R)=0$) gilt:

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(r)}{\mathrm{d}r^2}+k^2\varphi(r)=0, \qquad k^2=\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}. \tag{XI.19}$$

Gleichung (XI. 19) wird durch

$$\varphi(r)=\frac{\sin kr}{k}+f\,\mathrm{e}^{ikr}, \qquad r>R, \tag{XI.20}$$

$$\psi(r)=\frac{\sin kr}{kr}+f\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}, \qquad r>R \tag{XI.21}$$

gelöst, wobei $\sin kr/kr$ genau der s-Wellenanteil von $e^{ik\cdot r}$ ist. f ist die Amplitude der auslaufenden Kugelwelle. Im Innenbereich $r<R$ stellen wir $\varphi(r)$ dar als eine Entwicklung nach Lösungen $\varphi_\nu(r)$, die Eigenfunktionen der Schrödingergleichung

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon_\nu - U(r)\right\}\varphi_\nu(r)=0 \tag{XI.22}$$

seien. Wir wollen nun eine für das folgende wesentliche physikalische Annahme machen: Die $\varphi_\nu(r)$ sollen im Außenraum die Form auslaufender Kugelwellen haben, woraus sich über die Gleichheit der logarithmischen Ableitungen bei $r=R$ folgende Randbedingung ergibt:

$$\left\{\frac{1}{\varphi_\nu}\frac{d\varphi_\nu}{dr}=\frac{1}{e^{ikr}}\frac{de^{ikr}}{dr}\right\}_{r=R} \tag{XI.23}$$

oder

$$\left\{\frac{d\varphi_\nu}{dr}=ik\varphi_\nu\right\}_{r=R}. \tag{XI.24}$$

Die Entwicklung der Lösung $\varphi(r)$ von (XI.17) lautet:

$$\varphi(r)=\sum_\mu a_\mu\varphi_\mu(r). \tag{XI.25}$$

Wegen der imaginären Randbedingung (XI.24) sind die Eigenwerte von (XI.22) komplex oder anders ausgedrückt: Die Randbedingung auslaufender Kugelwellen für φ_ν entspricht dem Zerfall des quasistationären Zustands, die Resonanz hat eine endliche Breite. Man beachte, daß dies bereits für reelle Einteilchenpotentiale der Fall ist. Die Konsequenzen eines Imaginärteils werden wir noch genauer untersuchen.

Die auf die obige Weise definierten φ_μ bilden einen vollständigen Satz. Ihre Orthogonalität zeigt man wie folgt: Multipliziert man

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon_\mu - U(r)\right\}\varphi_\mu(r)=0 \tag{XI.26}$$

von links mit φ_ν und Gleichung (XI.22) von links mit φ_μ und subtrahiert die sich ergebenden Ausdrücke voneinander, so erhält man:

$$\left(\varphi_\mu\frac{d^2\varphi_\nu}{dr^2}-\varphi_\nu\frac{d^2\varphi_\mu}{dr^2}\right)+(k_\nu^2-k_\mu^2)\varphi_\mu\varphi_\nu=0. \tag{XI.27}$$

Integration von 0 bis R liefert (siehe z. B. [Da 65], S. 386):

$$\left(\varphi_\mu\frac{d\varphi_\nu}{dr^2}-\varphi_\nu\frac{d\varphi_\mu}{dr^2}\right)_{r=R}=(k_\mu^2-k_\nu^2)\int_0^R\varphi_\mu\varphi_\nu dr. \tag{XI.28}$$

Wegen (XI.24) verschwindet die linke Seite, und es ergibt sich:

$$(k_\mu^2 - k_\nu^2) \int_0^R \varphi_\mu \varphi_\nu \, dr = 0. \tag{XI.29}$$

Für $\mu \neq \nu$ gilt im allgemeinen $k_\mu \neq k_\nu$, und bei geeigneter Normierung folgt:

$$\int_0^R \varphi_\mu \varphi_\nu \, dr = \delta_{\mu\nu}. \tag{XI.30}$$

Diese Form der Orthogonalität beruht wesentlich auf der Randbedingung (XI.24).

Um nun die Entwicklungskoeffizienten a_μ in (XI.25) zu bestimmen, geht man ganz analog wie beim Beweis von (XI.30) vor. Mit

$$\mathscr{L} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \tag{XI.31}$$

gilt:

$$\int_0^R (\varphi_\mu \mathscr{L} \varphi - \varphi \mathscr{L} \varphi_\mu) dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\varphi_\mu \frac{d\varphi}{dr} - \varphi \frac{d\varphi_\mu}{dr} \right)_{r=R}. \tag{XI.32}$$

Drückt man die linke Seite von (XI.32) durch (XI.17) und (XI.22) aus und benutzt (XI.30), so folgt:

$$(\varepsilon - \varepsilon_\mu) a_\mu = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{d\varphi}{dr} - ik\varphi \right) \varphi_\mu \right\}_{r=R}. \tag{XI.33}$$

Mit (XI.20) ergibt sich weiter sofort:

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{e^{-ikR}}{\varepsilon_\mu - \varepsilon} \varphi_\mu(R). \tag{XI.34}$$

Die Stetigkeit von $\varphi(r)$ beim Übergang vom Innen- zum Außenraum liefert mit (XI.20) und (XI.25):

$$f = \frac{1}{k e^{ikR}} \left\{ \sum_\mu \frac{\hbar^2 k}{2m} e^{-ikR} \frac{\varphi_\mu^2(R)}{\varepsilon_\mu - \varepsilon} - \sin kR \right\}. \tag{XI.35}$$

Durch Definition der Breite

$$\Gamma_\mu = \frac{\hbar^2 k}{m} \varphi_\mu^2(R) \tag{XI.36}$$

erhält f die aus der allgemeinen Streutheorie bekannte Form:

$$f = \frac{e^{-2ikR}}{2k} \sum_\mu \frac{\Gamma_\mu}{\varepsilon_\mu - \varepsilon} - \frac{\sin kR}{k} e^{-ikR}. \tag{XI.37}$$

Gleichung (XI.37) entspricht genau dem s-Wellen-Anteil der allgemeinen Beziehung für die S-Matrix (siehe z.B. [BH59])

$$S_l = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\left(1 - \sum_\mu \frac{\mathrm{i}\Gamma_\mu}{\varepsilon - \varepsilon_\mu}\right), \tag{XI.38}$$

welche einen Resonanzcharakter der Streuung beschreibt. (Die Äquivalenz von (XI.37) und (XI.38) zeigt sich leicht mit den Beziehungen $\delta_0 \simeq -kR$ für $kR \ll 1$ und $f = \frac{i}{2k}(1 - S_0)$.) Der totale Wirkungsquerschnitt ist gegeben durch:

$$\sigma = 4\pi |f|^2 . \tag{XI.39}$$

Zur Bestimmung des Imaginärteils von ε_μ,

$$\varepsilon_\mu = \varepsilon_\mu^{\mathrm{r}} - \frac{\mathrm{i}}{2}\beta_\mu , \tag{XI.40}$$

verfahren wir wie bei der Ableitung der Orthogonalitätsrelationen (XI.30) und der Berechnung der Entwicklungskoeffizienten (XI.34). Wir bilden dazu aus (XI.22)

$$\int_0^R (\varphi_\mu \mathscr{L} \varphi_\mu^* - \varphi_\mu^* \mathscr{L} \varphi_\mu)\,\mathrm{d}r = (\varepsilon_\mu^* - \varepsilon_\mu)\int_0^R \varphi_\mu^* \varphi_\mu \,\mathrm{d}r , \tag{XI.41}$$

woraus dann folgt:

$$\beta_\mu = \frac{\hbar^2 k}{m} \frac{|\varphi_\mu(R)|^2}{\int_0^R |\varphi_\mu(r)|^2 \,\mathrm{d}r} . \tag{XI.42}$$

Die Breite β_μ hat eine anschauliche Bedeutung: Sie ist das Produkt aus Austrittsgeschwindigkeit $\hbar k/m$ und Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Streuteilchens auf der Kernoberfläche, bezogen auf die Gesamtwahrscheinlichkeit, das Teilchen im Kern zu finden. Für kleine Energien des Streuteilchens wird die Randbedingung (XI.24) reell, d.h. die φ_μ werden näherungsweise reell und mit (XI.30) und (XI.36) folgt:

$$\beta_\mu \simeq \Gamma_\mu . \tag{XI.43}$$

Für $\hbar k^2/2m \simeq 1\,\mathrm{MeV}$ ist Γ_μ von der Größenordnung 1 MeV, was in etwa den experimentell gefundenen Breiten entspricht. Für den Fall des Potentialtopfs läßt sich diese Abschätzung leicht quantitativ fassen. Man kann außerdem zeigen, daß Wellenfunktionen $\varphi_\mu^0(r)$, die der Randbedingung

$$\left(\frac{\mathrm{d}\varphi_\mu^0}{\mathrm{d}r}\right)_{r=R}=0 \tag{XI.44}$$

genügen, für niedrige Energien eine gute Näherung zur Berechnung von Größen darstellen, die aus (XI.22) und (XI.24) zu gewinnen sind. Ausführlicher sind diese Betrachtungen in einer Arbeit von Brown [Br 59] durchgeführt. Bis jetzt hatten wir noch nicht den Imaginärteil W von V berücksichtigt. Falls er räumlich konstant ist, führt er in (XI.40) einfach zu einer Verbreiterung der Resonanz ($W \simeq 1-2\,\mathrm{MeV}$):

$$\varepsilon_\mu=\varepsilon_\mu^r-\mathrm{i}\left(\frac{\beta_\mu}{2}+W\right). \tag{XI.45}$$

3. *Streuung am A-Nukleonensystem*

Während wir uns im vorhergegangenen Abschnitt mit der Streuung eines Teilchens an einem Potential, ausgedrückt durch die quasistationären Resonanzen des Systems, befaßt haben, wollen wir nun den Zusammenhang mit dem realistischen Problem der Streuung eines Nukleons an einem System von A Nukleonen herstellen. Wir beschränken uns hierbei wieder auf elastische Streuung. Es sei ξ die Gesamtheit der Koordinaten der A Targetnukleonen, $\boldsymbol{x}$ die Koordinate des Streuteilchens. Weiterhin soll die Wechselwirkung des Streuteilchens mit den A Targetteilchen außerhalb eines Radius R verschwinden (Antisymmetrisierung sowie Emission zusammengesetzter Teilchen wird damit vernachlässigt). Der Gesamtzustand Ψ des Systems bestimmt sich dann aus folgender Schrödingergleichung:

$$H\Psi=\varepsilon\Psi, \tag{XI.46}$$

$$H=H_\xi-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{x}}+V(\boldsymbol{x},\xi), \tag{XI.47}$$

$$V(\boldsymbol{x},\xi)=\sum_{i=1}^{A} v(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i). \tag{XI.48}$$

H_ξ soll dabei den Hamiltonoperator des A-Teilchensystems darstellen. In dem oben festgelegten Außenraum hat Ψ die Gestalt:

$$\Psi(x,\xi)=\left(\frac{\sin kx}{kx}+f\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{x}\right)\chi_0(\xi),\quad x>R, \tag{XI.49}$$

wobei $\chi_0(\xi)$ den Grundzustand des A-Teilchentargets bedeutet. Wir verfahren nun ähnlich wie in Abschnitt 2, indem wir $\Psi(x<R;\xi)$ nach

einem vollständigen Satz von Eigenfunktionen $\Phi^{(p)}(x,\xi)$ zu H entwickeln:

$$H\,\Phi^{(p)}(x,\xi) = E_p\,\Phi^{(p)}(x,\xi). \qquad \text{(XI.50)}$$

Diese Zustände $\Phi^{(p)}(x,\xi)$ sind die schon in der Einleitung erwähnten Compoundkernzustände des $(A+1)$-Nukleonensystems, da sie die volle Wechselwirkung des Streuteilchens mit den A Nukleonen des Kerns beinhalten. Die Entwicklung lautet dann:

$$\Psi(x,\xi) = \sum_p a_p\,\Phi^{(p)}(x,\xi). \qquad \text{(XI.51)}$$

Um die Verbindung mit dem optischen Potential herzustellen, entwickeln wir die Compoundzustände ihrerseits nach Zuständen $\chi_j(\xi)\,\psi_\mu(x)$, wobei die χ_j einen vollständigen Satz von Zuständen des A-Teilchensystems bilden und die $\psi_\mu(x) = \varphi(x)/x$ wie in Abschnitt 2 die Wellenfunktionen des Streuteilchens in einem komplexen Potential seien:

$$\Phi^{(p)}(x,\xi) = \sum_{j\mu} a^p_{j\mu}\,\chi_j(\xi)\,\psi_\mu(x) \qquad \text{(XI.52)}$$

(In der Randbedingung (XI.24) ist jetzt allerdings k zu ersetzen durch $(2m(\varepsilon - E^A_j))^{1/2}/\hbar$, wobei E^A_j die zu χ_j gehörige Energie ist. Diese j-Abhängigkeit der ψ_μ sei der Einfachheit halber im folgenden nicht explizit angegeben.) Die Energien E_p des $(A+1)$-Teilchen-Compound-Kerns sind wiederum komplex:

$$E_p = E^r_p - \frac{i}{2}\alpha_p. \qquad \text{(XI.53)}$$

Diese Compoundkernresonanzen entsprechen den in der Einleitung erwähnten Feinstrukturlinien von etwa 1 eV Breite, die bei niederenergetischer Streuung in den $1-2$ MeV breiten Resonanzkurven zu finden sind. Diese Breiten α_p und die Streuamplitude f berechnen sich ganz analog zu Abschnitt 2 durch Anwendung des Greenschen Satzes und unter Ausnutzung der Randbedingung. In unserem vereinfachten Fall (nur elastische Streuung) gilt

$$\chi_j(\xi) \to 0, \qquad \text{(XI.54)}$$

falls die Radialkoordinate irgendeines der A Teilchen groß wird. Damit sind zusammen mit (XI.24) die Randbedingungen der $\Phi^{(p)}$ eindeutig festgelegt und man erhält (siehe [Br 59]):

$$f = \frac{e^{-2ikR}}{2k}\sum_p \frac{\gamma_p}{E_p - \varepsilon} - \frac{\sin kR}{k}\,e^{-ikR}, \qquad \text{(XI.55)}$$

$$\gamma_p = \frac{\hbar^2 k}{m}\sum_{\mu\mu'} a^p_{0\mu} a^p_{0\mu'}\,\varphi_\mu(R)\,\varphi_\mu(R). \qquad \text{(XI.56)}$$

In (XI.56) trägt zu γ_p nur der Term mit $j=0$ bei, was darauf beruht, daß wir nur elastische Streuung betrachten. Die sogenannten reduzierten Breiten γ_p haben wieder eine anschauliche physikalische Erklärung: die Amplituden $a^p_{0\mu}$ sind gerade die Überlappintegrale zwischen einem nach (XI.51) zu Ψ beitragenden Compoundzustand $\Phi^{(p)}$ und einem Produktzustand, bestehend aus dem A-Teilchengrundzustand $\chi_0(\xi)$ mal der Potentialresonanz $\psi_\mu(x)$, d.h. $(a^p_{0\mu})^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, mit der ein solcher Produktzustand, in dem das Streuteilchen das Target nur als mittleres Potential „sieht", in $\Phi^{(p)}$ vorkommt. Analog zu Abschnitt 2 kann man wieder zeigen, daß für kleine Energien gilt $\gamma_p \simeq \alpha_p$; d.h. die Breite eines Compoundzustandes, der zu einem $(A+1)$-Teilchensystem gehört und der in den A-Teilchengrundzustand und ein Streuteilchen zerfällt, muß gerade proportional den Produkten der zugehörigen Überlappfunktionen sein. Wie ein Vergleich der Ausdrücke (XI.55) und (XI.37) zeigt, erhalten wir für die Streuamplitude f bei s-Streuung in den beiden in Abschnitt 2 bzw. 3 diskutierten Fällen ganz analoge Ausdrücke, wobei im Fall der Compoundstreuung nur Γ_μ durch γ_p und ε_μ durch E_p zu ersetzen ist.

Die Kleinheit der γ_p gegenüber den Γ_μ rührt von der Proportionalität zu den Amplituden $a^p_{0\mu}$ her. Aus der Normierung der Zustände $\Phi^{(p)}$ folgt nämlich:

$$\sum_{j\mu} (a^p_{j\mu})^2 = 1. \tag{XI.57}$$

Andererseits kann man annehmen, daß die Restwechselwirkung stark genug ist, um viele Zustände $\chi_j(\xi)\psi_\mu(x)$ in einem Compoundzustand $\Phi^{(p)}(\xi, x)$ zu mischen. Daraus folgt, daß die einzelnen Anteile nur mit einer Wahrscheinlichkeit $(a^p_{j\mu})^2 \ll 1$ vertreten sein können und daher auch die Amplituden $a^p_{0\mu}$ sehr klein sind.

Das in diesem Abschnitt gefundene Auftreten sehr schmaler Compoundresonanzen steht zunächst in Widerspruch zu dem in Fig. 47 gezeigten und in Abschnitt 2 qualitativ erklärten Verhalten der elastischen Wirkungsquerschnitte mit breiten Resonanzmaxima. Zur Erklärung dieser Diskrepanz macht man sich daher folgendes physikalisches Bild: Wäre das optische Modell exakt, so ergäbe sich für ein bestimmtes Niveau ein entsprechender Koeffizient $a^p_{0\mu}$ zu Eins, d.h. der exakte Zustand wäre gleich $\chi_0(\xi)\psi_\mu(x)$; die Restwechselwirkung ist in Wirklichkeit zwar stark genug, diesen quasistationären Zustand in sehr viele Einzelzustände aufzuspalten, vermag jedoch nicht die optischen Potentialresonanzen zu mischen. Die aus einer exakten Diagonalisation hervorgehenden Zustände mit der Breite α_p werden sich also im wesentlichen um das alte Einteilchenniveau gruppieren in einem Bereich B, der kleiner

ist als die Differenz zweier aufeinanderfolgender Einteilchenenergien. Eine schlechte experimentelle Auflösung läßt dann nur noch eine Resonanz der Breite Γ erkennen, die sich aus allen Breiten α_p der Compoundresonanzen zusammensetzt (Fig. 48). Es kann allerdings auch sein, daß die Compoundresonanzen so dicht liegen, daß eine Auflösung auch prinzipiell nicht möglich ist. Diese Vorstellungen sollen im kommenden Abschnitt etwas präziser gefaßt werden.

4. Mittlere Streuamplituden und Wirkungsquerschnitte im Rahmen des optischen Modells

Die folgende Betrachtungsweise wurde im wesentlichen von Feshbach, Porter und Weisskopf [Fe 54] und von Friedmann und Weisskopf [FW 55] entwickelt und besteht hauptsächlich in einer Aufspaltung der Streuamplitude f:

$$f = \langle f \rangle + f - \langle f \rangle = \langle f \rangle + f^{\mathrm{ce}}. \qquad \text{(XI.58)}$$

Hierbei ist $\langle f \rangle$ die über ein bestimmtes Energieintervall B gemittelte Streuamplitude, wobei wir die genaue Art der Mittelung noch angeben werden. Den mittleren Wirkungsquerschnitt kann man dann in folgender Weise ausdrücken (vgl. (XI.39)):

$$\langle \sigma \rangle = 4\pi |\langle f \rangle|^2 + 4\pi \langle |f - \langle f \rangle|^2 \rangle \qquad \text{(XI.59)}$$

(der Kreuzterm verschwindet bei der Mittelung). Die beiden Terme auf der rechten Seite von (XI.59) unterscheiden sich physikalisch in folgender Weise:

1. Term:

Die Mittelung über ein Energieintervall B entspricht der Streuung eines Wellenpakets der Breite B. Aufgrund der Unschärfebeziehung zwischen Energie und Zeit

$$\tau \geq \frac{\hbar}{\Delta E} \qquad \text{(XI.60)}$$

durchlaufen die Teilchen, deren Streuung von der mittleren Streuamplitude $\langle f \rangle$ beschrieben wird, den Kern in der Zeit τ. Anders ausgedrückt: Der Zerfall eines Zwischenzustandes der Breite

$$\Delta E = B \qquad \text{(XI.61)}$$

erfolgt mit einer Halbwertszeit $\simeq \tau$. Bei genügend großem Energieintervall B ist es deshalb vernünftig anzunehmen, daß die Streuteilchen trotz

der starken Wechselwirkung mit den Targetnukleonen nur einige wenige Stöße erleiden und deshalb ihre Streuung durch ein Modell beschrieben werden kann, das einer schwachen Kopplung entspricht, eben dem optischen Modell.

2. Term:

In diesem Term sind alle die Resonanzen enthalten, die als Compoundkernresonanzen im vorhergegangenen Kapitel diskutiert worden sind und von denen wir wissen, daß sich die zugehörigen Streuamplituden und Wirkungsquerschnitte in Energieintervallen von ca. 1 eV ändern. Dies bedeutet, daß die vermöge des 2. Terms gestreuten Teilchen etwa 10^6 mal länger im Kern verweilen und auch 10^6 mal mehr Stöße ausführen. Dieser Anteil von $\langle\sigma\rangle$ entspricht aber genau der früher erwähnten compoundelastischen Streuung.

Aufgrund der oben angestellten Überlegungen werden wir also $|\langle f\rangle|^2$ durch ein komplexes Potential V beschreiben, wobei dann der Imaginärteil gerade die Nukleonen pauschal berücksichtigt, die aus dem Einfallsstrahl in die langlebige Komponente verschwinden. V wird also so gewählt, daß die zugehörige Streuamplitude $\hat{f}$ gleich der über das Energieintervall B gemittelten wird:

$$\hat{f}=\langle f\rangle. \tag{XI.62}$$

Wir wollen nun die Mittelungsvorschrift und den Zusammenhang zwischen den Einteilchenbreiten Γ der Resonanzen im optischen Potential sowie den Compoundbreiten γ nach einer zuerst von Lane, Thomas und Wigner [La 55] gegebenen Darstellung noch etwas genauer diskutieren. Die in (XI.58) definierte compoundelastische Streuamplitude drücken wir dazu durch die Beziehungen (XI.37) und (XI.55) aus, wobei wir uns wieder auf s-Wellenstreuung beschränken. Dann folgt:

$$f^{\mathrm{ce}}=\frac{\mathrm{e}^{-2ikR}}{2k}\left\{\sum_p \frac{\gamma_p}{E_p-\varepsilon}-\sum_\mu \frac{\Gamma_\mu}{\varepsilon_\mu-\varepsilon}\right\}. \tag{XI.63}$$

Per definitionem gilt:

$$\langle f^{\mathrm{ce}}\rangle=0. \tag{XI.64}$$

Bei einem Mittelungsintervall, das sehr viel kleiner als die Breite der Einteilchenresonanz ist, braucht über den letzten Term von Gleichung (XI.63) nicht gemittelt zu werden und man erhält:

$$\left\langle\sum_p \frac{\gamma_p}{E_p-\varepsilon}\right\rangle = P(\varepsilon)+\mathrm{i}\,Q(\varepsilon)=\sum_\mu \frac{\Gamma_\mu}{\varepsilon_\mu-\varepsilon}. \tag{XI.65}$$

Nehmen wir an, daß Γ_μ reell sei (niedriger Energiebereich), so können wir $P(\varepsilon)$ und $Q(\varepsilon)$ sofort durch die rechte Seite von (XI.65) ausdrücken:

$$P(\varepsilon)=\sum_\mu \frac{\Gamma_\mu(\varepsilon_\mu^{\mathrm{r}}-\varepsilon)}{(\varepsilon_\mu^{\mathrm{r}}-\varepsilon)^2+(W+\frac{1}{2}\beta_\mu)^2}, \tag{XI.66}$$

$$Q(\varepsilon)=\sum_\mu \frac{\Gamma_\mu(W+\frac{1}{2}\beta_\mu)}{(\varepsilon_\mu^{\mathrm{r}}-\varepsilon)^2+(W+\frac{1}{2}\beta_\mu)^2}. \tag{XI.67}$$

Hieraus ergibt sich, daß für $\varepsilon \simeq \varepsilon_\nu^{\mathrm{r}}$ unter der Voraussetzung gut getrennter Einteilchenresonanzen $Q(\varepsilon)$ gegeben ist durch:

$$Q(\varepsilon) \simeq \frac{\Gamma_\nu(W+\frac{1}{2}\beta_\nu)}{(\varepsilon_\nu^{\mathrm{r}}-\varepsilon)^2+(W+\frac{1}{2}\beta_\nu)^2}. \tag{XI.68}$$

Indem wir eine explizite Mittelungsvorschrift für die linke Seite von (XI.65) angeben, können wir $Q(\varepsilon)$ auch durch die γ_p ausdrücken und somit zwischen den Breiten der Compoundkernresonanzen und den Breiten der Einteilchenresonanzen eine explizite Beziehung herstellen. Es sei dazu der Mittelwert einer Größe $F(E)$ definiert:

$$\langle F(E)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(E-E')F(E')\mathrm{d}E'. \tag{XI.69}$$

Die Gewichtsfunktion ρ ist dabei zunächst beliebig. Von Feshbach, Porter und Weisskopf [Fe 54] wird folgender Ausdruck verwendet:

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{B} & |x| \leqslant \frac{B}{2}, \\ 0 & |x| > \frac{B}{2}. \end{cases} \tag{XI.70}$$

Das heißt:

$$\langle F(E)\rangle = \frac{1}{B}\int_{-\frac{B}{2}}^{+\frac{B}{2}} F(E')\mathrm{d}E'. \tag{XI.71}$$

Den meisten Problemen besser angepaßt ist die Lorentzverteilung:

$$\rho(x) = \frac{B}{\pi}\frac{1}{x^2+B^2}. \tag{XI.72}$$

Man kann mit ihr (XI.69) analytisch durch komplexe Integration auswerten, falls $F(E)$ nur Pole in der unteren Halbebene besitzt:

$$\langle F(E)\rangle = F(E+\mathrm{i}B). \tag{XI.73}$$

Wendet man diese Bezeichnung auf Gleichung (XI.65) an, so findet man:

$$\left\langle\sum_p \frac{\gamma_p}{E_p-\varepsilon}\right\rangle = \sum_p \frac{\gamma_p}{E_p-\varepsilon-\mathrm{i}B}, \tag{XI.74}$$

$$Q(\varepsilon) = \mathrm{Im}\sum_p \frac{\gamma_p}{E_p-\varepsilon-\mathrm{i}B}. \tag{XI.75}$$

(XI.74) läßt sich noch weiter umformen, indem man von der Summe zum Integral übergeht, was bei der hohen Dichte der Compoundzustände (etwa 10^6/MeV) erlaubt ist. Unter Einführung der mittleren Dichte $1/D$ (D Niveauabstand, $1/D$ Zahl der Niveaus pro Energieeinheit) und der mittleren Breite $\bar{\gamma}$ folgt aus (XI.75):

$$Q(\varepsilon) \simeq \frac{1}{D}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\bar{\gamma}B}{(E-\varepsilon)^2+B^2}\,\mathrm{d}E = \pi\frac{\bar{\gamma}}{D} \tag{XI.76}$$

(hierbei ist die Compoundbreite α_p gegen B vernachlässigt worden). Ein Vergleich mit (XI.68) liefert:

$$\pi\frac{\gamma}{D} = \frac{\Gamma_\nu(W+\frac{1}{2}\beta_\nu)}{(\varepsilon_\nu^{\mathrm{r}}-\varepsilon)^2+(W+\frac{1}{2}\beta_\nu)^2}, \quad \varepsilon \simeq \varepsilon_\nu^{\mathrm{r}}. \tag{XI.77}$$

Die Größe $\pi\bar{\gamma}/D$ heißt *Stärkefunktion* (strength function) und hat eine sehr anschauliche Bedeutung. Sie ist nämlich ein Maß für die Auflösbarkeit der Compoundniveaus: Für kleine Werte von $\pi\bar{\gamma}/D$ sind die Niveaus gut getrennt, für große Werte überlappen sie sich. Der Name Stärkefunktion rührt daher, daß $\pi\bar{\gamma}/D$ in sehr einfacher Weise mit dem totalen Wirkungsquerschnitt σ_{T} zusammenhängt. Mit dem optischen Theorem

$$\sigma_{\mathrm{T}} = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,f \tag{XI.78}$$

und mit den Beziehungen (XI.55) und (XI.75) erhält man nämlich:

$$\langle\sigma_{\mathrm{T}}\rangle \simeq \frac{2\pi^2}{k^2}\,\frac{\bar{\gamma}}{D}. \tag{XI.79}$$

Diese Gleichung kann zur experimentellen Bestimmung der Stärkefunktion herangezogen werden und man ersieht daraus, daß sie in ihrem Resonanzverhalten denselben Gang hat wie $\langle\sigma_{\mathrm{T}}\rangle$.

Wir kehren an dieser Stelle noch einmal zu der am Ende von Abschnitt 3 diskutierten Vorstellung zurück. Die Restwechselwirkung des Streuteilchens mit den Targetnukleonen spaltet danach zwar das Einteilchenniveau des optischen Potentials in Tausende und Millionen

von Unterniveaus auf, ist aber zu schwach, um verschiedene Einteilchenniveaus zu mischen (Fig. 49). Insbesondere hat dies zur Folge, daß für $\varepsilon \simeq \varepsilon_\nu^r$ in Formel (XI.56) nur Amplituden $a_{0\mu}^p$, $a_{0\mu'}^p$ mit $\mu = \mu' = \nu$ einen wesentlichen Beitrag liefern, γ_p also in guter Näherung folgende Gestalt annimmt:

$$\gamma_{p_\nu} \simeq (a_{0\nu}^p)^2 \Gamma_\nu, \qquad \varepsilon \simeq \varepsilon_\nu^r. \tag{XI.80}$$

Der Index p_ν soll hier auf einen Compoundzustand in der Nähe von ε_ν^r hindeuten. Berücksichtigt man weiter die Vollständigkeit der $\Phi^{(p)}$, so folgt aus (XI.80):

$$\sum_p{}' \gamma_{p_\nu} \simeq \Gamma_\nu. \tag{XI.81}$$

Der Strich am Summenzeichen soll dabei bedeuten, daß die Summe nur über Compoundzustände in der Nähe von ε_ν^r läuft. Nach unserem Bild ergibt sich also die wichtige Relation, daß die Summe der Breiten γ_{p_ν} von Compoundzuständen in der Umgebung einer Einteilchenresonanz gerade gleich der Breite dieser Resonanz ist, solange die Einteilchen-

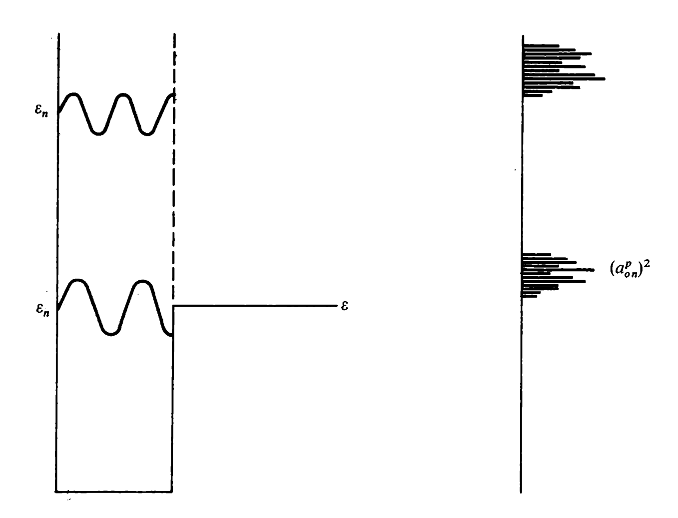


Fig. 49 Auf der linken Seite werden die 4s- und 5s-Einteilchenresonanzen im komplexen Potential gezeigt; auf der rechten Seite ist das Verhalten des Quadrates der Entwicklungskoeffizienten $a_{0\mu}^p$ aufgetragen. Das Verhalten der Stärkefunktion und damit das von $\langle\sigma_T\rangle$ ist im wesentlichen dasselbe (nach [Br 59]).

resonanzen nur weit genug voneinander entfernt sind. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Compoundresonanzen um einen Einteilchenzustand erhält man, wenn man (XI.80) in (XI.77) einsetzt:

$$(a_{0\nu}^{p})^2 \simeq \frac{D}{\pi} \frac{W+\frac{1}{2}\beta_\nu}{(\varepsilon_\nu^r-\varepsilon)^2+(W+\frac{1}{2}\beta_\nu)^2}, \quad \varepsilon \simeq \varepsilon_\nu^r. \tag{XI.82}$$

Das heißt, diese Verteilung stellt bei konstantem W und β_ν ebenfalls eine Lorentzverteilung dar (Fig. 49).

Es sei darauf hingewiesen, daß sich alle unsere Ableitungen und Vorstellungen wesentlich auf die Annahme stützen, daß bei einer exakten Diagonalisation die Einteilchenniveaus über einen Bereich aufspalten, der klein gegenüber der Differenz zweier benachbarter Einteilchenniveaus ist. Dies müßte im Einzelfall rechnerisch nachgeprüft werden, kann aber wegen der großen Dimension der zu diagonalisierenden Matrix im allgemeinen nicht ausgeführt werden. Trotzdem hat diese Vorstellung aufgrund der experimentellen Tatsachen ihre Berechtigung: Im Wirkungsquerschnitt werden breite Resonanzmaxima mit einer feinen Unterstruktur gefunden (siehe Fig. 48).

Ein weiterer Aspekt unserer Vorstellungen ist der, daß bei Experimenten, bei denen die Feinstruktur der Resonanzen nicht zutage tritt, diese wie ein einziger Zustand mit der Breite Γ wirken. Das heißt, man kann sich diese Zustände aus einer Eins-zu-Eins-Zuordnung aus den Einteilchenzuständen des optischen Potentials unter langsamer Einschaltung der Restwechselwirkung entstanden denken. In Wirklichkeit entsprechen jedoch die breiten „optischen" Resonanzen keinen Einteilchenresonanzen in einem Potential, sondern setzen sich aus lauter Compoundresonanzen zusammen, die von der Dynamik aller $(A+1)$ Nukleonen bestimmt werden. Diesem Sachverhalt trägt man Rechnung, indem man die breiten Resonanzen als *Einquasiteilchenresonanzen* bezeichnet. Eine genauere Diskussion des Begriffs „Quasiteilchen" ist im folgenden Kapitel zu finden.

Bestimmung der Parameter des optischen Potentials. Ohne auf Einzelheiten näher einzugehen, wollen wir noch erwähnen, daß möglichst optimale komplexe Einteilchenpotentiale meist dadurch bestimmt werden, daß man sechs Parameter (Tiefe, Reichweite, „diffuseness" des rellen und imaginären Potentials) mit Hilfe einer Rechenmaschine so lange variiert, bis die experimentell bestimmten und die in Potentialnäherung berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte möglichst gut übereinstimmen.

Fig. 50 zeigt einen auf diese Weise gewonnenen Verlauf im Vergleich mit dem Experiment. Typische Werte für die Tiefen des reellen bzw. imaginären Potentials ergeben sich zu 40 bis 50 MeV bzw. 1 bis 2 MeV.

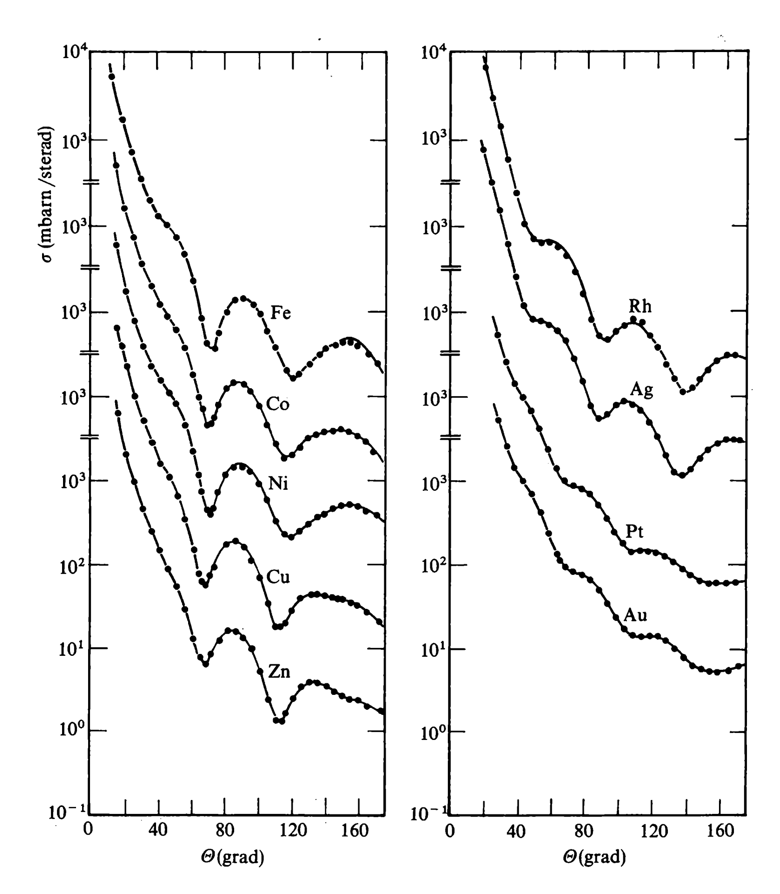


Fig. 50 Durch das optische Modell gefittete elastische Streudaten (nach Perey [Pe 63]).

XII. QUASITEILCHEN

Die in den vorangegangenen Kapiteln beschriebenen Kernmodelle beruhten im wesentlichen auf der Annahme eines Modells sich unabhängig voneinander bewegender Teilchen. Diese phänomenologisch eingeführten Schalenmodelle wurden an die Spitze unserer Betrachtungen gestellt und sie erlauben, wie wir gesehen haben, die Deutung und Klassifikation vieler kernphysikalischer Daten; sie konnten dadurch als brauchbarer Ausgangspunkt für weitergehende Näherungen gewählt werden. An keiner Stelle wurde aber noch etwas über die theoretische Begründung dieses Modells gesagt, obwohl es doch zunächst als überraschend erscheint, daß bei der starken Kurzreichweitigkeit der Nukleon-Nukleon-Kräfte ein von allen Nukleonen erzeugtes mittleres Potential die überwiegende Rolle spielen sollte. Es würde weit über den Rahmen dieses Buches hinausgehen, wenn wir auf diesen Punkt näher eingehen wollten. Ganz im Gegensatz zu dem in den übrigen Kapiteln beschrittenem Weg, wo wir uns bemühten, allen physikalischen Überlegungen eine leicht nachzuprüfende mathematische Ableitung gegenüberzustellen, müssen wir uns daher – um wenigstens die physikalischen Grundgedanken verständlich zu machen – weitgehend auf phänomenologische Betrachtungen beschränken.

Ein wichtiger Gesichtspunkt für die Brauchbarkeit des Schalenmodells ist sicher durch das Pauliprinzip gegeben: Die Nukleonen eines Atomkerns würden nämlich im allgemeinen in sehr kurzen Zeitabständen aneinader gestreut werden; aufgrund des Pauliprinzips sind aber – wenigstens im Grundzustand – keine Streuzustände frei, so daß ein Stoß zweier Nukleonen nur über eine virtuelle Anregung erfolgen kann. Wegen des dazu benötigten hohen Energieaufwandes ist dieser Prozeß jedoch unwahrscheinlich, und man kann sich so eine relativ lange Lebensdauer von Einnukleonenzuständen erklären. Wir wollen in diesem Kapitel jedoch mehr auf einen anderen Aspekt des Schalenmodells eingehen, der eng mit der von Landau [La 59] angegebenen Theorie für eine wechselwirkende Fermiflüssigkeit in Zusammenhang steht. Dazu entwickeln wir zunächst einige Grundvorstellungen dieser Theorie, indem wir näherungsweise den Kern als ausgedehnte Kernmaterie, bestehend aus nur einer Nukleonensorte betrachten. Am Ende dieses Kapitels werden wir noch kurz auf die notwendigen Änderungen eingehen, wenn man die Überlegungen Landaus auf einen endlichen Kern anwendet (Migdal [Mi 64]).

Begriff des Quasiteilchens. Stellen wir uns eine wechselwirkende Fermiflüssigkeit (N Teilchen) im Grundzustand vor, dann können wir uns eine Anregung des $(N+1)$-Teilchensystems dadurch erzeugt denken, daß wir zum N-Teilchengrundzustand ein Teilchen mit dem Impuls $k > k_F$ hinzufügen. Dieses Teilchen wird wegen der starken Wechselwirkung mit den übrigen Teilchen seine Umgebung in einer gewissen Weise beeinflussen, d.h., die Dichte ρ der Flüssigkeit wird in einer Umgebung um das hinzugefügte Teilchen etwas verändert sein (Polarisationswolke des Teilchens). Das Teilchen zusammen mit seiner Polarisationswolke (Fig. 51) bezeichnet man als angezogenes oder Quasi-Teilchen mit dem Impuls $\boldsymbol{k}$.

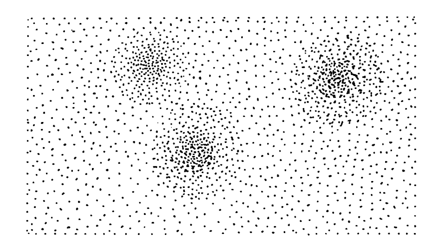


Fig. 51 Quasiteilchen in einer Fermiflüssigkeit.

Die „normalen" Teilchen werden im Gegensatz dazu als „nackte" Teilchen bezeichnet. Es ist darauf zu achten, daß solch ein Quasiteilchen immer nur *ein* nacktes Teilchen enthält.

Das Teilchen mit seiner Polarisationswolke hat denselben Spin wie das nackte Teilchen. Dies bedeutet bei Kernmaterie, daß die Quasiteilchen ebenfalls Fermionen sind.

Es ist weiter anschaulich klar, daß, je höher die Anregung, d.h. je größer die Geschwindigkeit des hinzugefügten Teilchens ist, desto kleiner der Einfluß auf die Umgebung, d.h. desto kleiner die Polarisationswolke sein wird. Das Konzept des Quasiteilchens wird sich also nur auf tiefliegende Anregungen anwenden lassen. Dies ist ein sehr wichtiger Punkt des Problems, den wir bei allen folgenden Überlegungen ständig als stillschweigend vorausgesetzt annehmen wollen.

Mehrere Quasiteilchen können wir uns dadurch entstanden denken, daß wir der Fermiflüssigkeit mehrere nackte Teilchen hinzufügen. Solange die Zahl der Quasiteilchen sehr klein gegenüber N ist, werden sie im Mittel weit voneinander entfernt sein, d.h., wenn der mittlere Ab-

stand der nackten Nukleonen von der Größenordnung der Reichweite der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ist, sind die Quasiteilchen im Durchschnitt sehr viel weiter voneinander entfernt (verdünntes Quasiteilchengas). Die Wechselwirkung zwischen ihnen wird deshalb *im Mittel* wesentlich schwächer als die zwischen nackten Teilchen sein, obwohl sie an sich von derselben Größenordnung ist.

Dieselben Betrachtungen gelten auch für den Fall, daß man Teilchen aus der Flüssigkeit fortnimmt, d.h. Quasilöcher erzeugt. Wegen der Konstanz der Teilchenzahl können außerdem Quasiteilchen und Quasilöcher nur paarweise erzeugt werden. Für Quasiteilchen gilt immer $k > k_F$ und für Quasilöcher $k < k_F$, d.h. der Begriff der Fermikante kann für die Quasiteilchen aufrechterhalten werden. Wir können uns somit die den freien Quasiteilchen entsprechenden tiefliegenden Anregungszustände analog zu denen eines idealen Gases nackter Teilchen folgendermaßen entstanden denken: Ausgehend von einem bis zur Fermikante aufgefüllten System freier Quasiteilchen (Rechteckverteilung N_k^0) können wir Anregungen dadurch erzeugen, daß wir Quasiteilchen von wenig unterhalb nach wenig oberhalb der Fermikante befördern (Fig. 52).

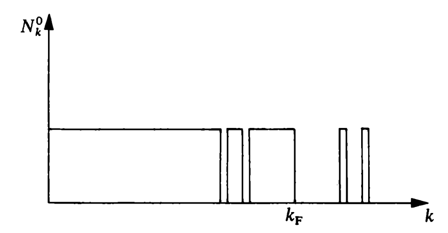


Fig. 52 Quasiteilchenanregungen.

Es sei dabei betont, daß N_k^0 nur definiert ist, wenn wir uns für Anregungen nahe der Fermikante interessieren. Man könnte in diesem Zusammenhang versucht sein, den Grundzustand aus N Quasiteilchen aufgebaut anzunehmen, die sich innerhalb der Fermioberfläche befinden: Dies hat keinen Sinn, da die Verteilung N_k^0 nur eingeführt wurde, um die *Quasiteilchenanregungen* beschreiben zu können und nicht den Grundzustand. Außerdem sind Quasiteilchen nur in der unmittelbaren Nähe der Fermikante definiert. Berücksichtigt man, daß die Quasiteilchen – wenn auch schwächer als die nackten Teilchen – untereinander wechselwirken, so wird die in Fig. 52 dargestellte Fermikante etwas auf-

geweicht und die Rechteckverteilung N_k^0 geht in die Verteilung N_k der Quasiteilchen über.

Außer Impuls und Spin kann man den Quasiteilchen auch eine Energie ε_k zuordnen. Sie ist definiert als Differenz der Gesamtenergie E des $(N+1)$-Teilchensystems, das ein Quasiteilchen enthält und der Grundzustandsenergie E_0 des N-Teilchensystems (im folgenden sollen im Index k immer die Quantenzahlen des Impulses $\boldsymbol{p}$ *und* des Spins s zusammengefaßt sein):

$$\varepsilon_k = E(\ldots, N_k^0+1, \ldots) - E_0, \tag{XII.1}$$

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 + \frac{1}{\Omega} \sum_{k'} (f_{kk'})_{\substack{N_k = N_k^0 \\ N_{k'} = N_{k'}^0}} \delta N_{k'} + \cdots \tag{XII.2}$$

ε_k^0 ist dabei die erste Funktionalableitung der Energie nach der Quasiteilchenverteilung

$$\varepsilon_k^0 = \left(\frac{\partial E}{\partial N_k}\right)_{N_k = N_k^0} \tag{XII.3}$$

und stellt die Energie eines Quasiteilchens dar, wenn es als einziges vorhanden ist. Wenn es von einem Gas anderer Quasiteilchen umgeben ist, wird ε_k^0 in niedrigster Näherung um den zweiten Term in (XII.2) abgeändert, wobei $f_{kk'}$ die zweite Funktionalableitung von E bedeutet:

$$f_{kk'} = \Omega \frac{\partial^2 E}{\partial N_k \partial N_{k'}} \tag{XII.4}$$

(Ω ist das von der Fermiflüssigkeit eingenommene Volumen). Wie schon erwähnt, ist es anschaulich klar, daß die Wechselwirkung zwischen den Quasiteilchen im Mittel schwächer sein wird als die zwischen den nackten Nukleonen. Mit dieser „effektiven" Wechselwirkung kann $f_{kk'}$ identifiziert werden. Dies macht man sich am besten an der Hartree-Fock-Näherung für normale Teilchen klar. Die Grundzustandsenergie kann hierfür geschrieben werden als

$$E_0^{\mathrm{HF}} = \sum_k \frac{p^2}{2m} N_k + \tfrac{1}{2} \sum_{kk'} \bar{v}_{kk',kk'} N_k^{\mathrm{HF}} N_{k'}^{\mathrm{HF}} \tag{XII.5}$$

und f^{HF} stellt in diesem Fall die nackte Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung dar (vgl. (XII.4)):

$$f_{kk'}^{\mathrm{HF}} = \Omega \bar{v}_{kk',kk'}. \tag{XII.6}$$

Für die Quasiteilchen wird folglich f die zwischen ihnen wirkende effektive Wechselwirkung bedeuten. Ein weiterer wichtiger Begriff ist die effektive Masse m^* eines Quasiteilchens, die man formal dadurch

einführen kann, indem man fordert, daß die Quasiteilchenenergien dieselbe Impulsabhängigkeit haben, wie die normalen Teilchen:

$$\varepsilon_p \equiv \frac{p^2}{2m^*}. \tag{XII.7}$$

Im allgemeinen wird m^* noch vom Impuls abhängen; in guter Näherung kann man jedoch den Wert von m^* an der Fermikante nehmen. Ein wesentlicher Gesichtspunkt der Landauschen Theorie ist es, f nicht aus der nackten Zweiteilchenwechselwirkung zu berechnen, sondern an experimentelle Größen anzupassen. Berücksichtigt man, daß $f_{kk'}$ nur an der Fermikante definiert ist $(p, p' \simeq p_F)$, so hängt $f_{kk'}$ nur vom Zwischenwinkel Θ der beiden Impulse $\boldsymbol{p}$ und $\boldsymbol{p}'$ ab. Entwickelt man hiermit f nach Kugelfunktionen

$$f_{kk'} = \sum_n f_n P_n(\cos\Theta), \tag{XII.8}$$

so sind die beiden ersten Entwicklungskoeffizienten f_0 und f_1 direkt mit meßbaren Größen verknüpft: f_0 kann aus der Schallgeschwindigkeit, f_1 aus der spezifischen Wärme des Systems bestimmt werden (siehe z.B. Nozières [No 64], S. 7ff., und Thouless [Th 64], S. 97f.). Dies kann natürlich nur für reale Fermiflüssigkeiten – wie etwa flüssiges He^3 – durchgeführt werden. Landau konnte damit den bei He^3 auftretenden nullten Schall mit Erfolg voraussagen. Für Kernmaterie sind diese Konstanten an Kerndaten anzupassen (siehe Migdal [Mi 63]). Wir wollen die hierbei auftretenden Gesichtspunkte jedoch nicht näher betrachten, sondern die von Migdal [Mi 64] für endliche Kerne angegebenen Abänderungen der Landauschen Theorie diskutieren.

Endliche Kerne. Es ist im Prinzip klar, wie die obigen Überlegungen auf den endlichen Kern zu übertragen sind: Die Quasiteilchenzustände sind hier die Schalenmodellzustände, wie dies schon im letzten Kapitel bei der Diskussion der optischen Potentialresonanzen angedeutet wurde. Aufgrund der durch Stöße begrenzten Lebensdauer der Quasiteilchen werden diese Zustände eine bestimmte Breite haben, und zwar werden sie umso schneller zerfallen, je mehr Stöße die Quasiteilchen erleiden, d.h., je weiter sie von der Fermikante entfernt sind. Zwei Quasilochzustände sehen wir in Fig. 10 des I. Kapitels. (Um Verwirrung zu vermeiden, sei noch ein Wort zu den im Kapitel VII behandelten Quasiteilchen des BCS-Formalismus gesagt. Hierbei wurde noch ein Teil (nämlich der Paaranteil) der zwischen den Quasiteilchen der Schalenmodellzustände wirkenden effektiven Wechselwirkung diagonalisiert.

Man könnte im obigen Sinn die aus der Bogolyubov-Transformation hervorgehenden Quasiteilchen mit Energien $e_k = (\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}$ als „Quasi-quasi-Teilchen" bezeichnen).

Solange wir uns für Phänomene interessieren, an denen nur ein Quasiteilchen teilnimmt, wie etwa bei den beobachteten Einteilchenübergängen (siehe Kap. II), werden wir erwarten, daß das Schalenmodell schon eine gute Beschreibung liefert. Bei Prozessen, bei denen die Bewegung mehrerer Quasiteilchen eine Rolle spielt, wie etwa der Dipolriesenresonanz, müssen wir deren gegenseitige Wechselwirkung berücksichtigen. Aufgrund der geringen mittleren Stärke dieser Wechselwirkung verstehen wir jetzt besser, daß wir uns, wie in Kapitel VI diskutiert, z. B. zur Erklärung der Riesenresonanzen bei der Diagonalisation der Restwechselwirkung auf einen sehr kleinen Unterraum beschränken können. Es ist unter diesem Gesichtspunkt auch einzusehen, warum es genügt, in diesen Rechnungen „schwach veränderliche" Potentiale, wie z.B. das Gaußpotential, das keinen hard core besitzt, zu verwenden.

Der wesentlichste Unterschied zum Fall der Kernmaterie besteht darin, daß für endliche Kerne die effektive Wechselwirkung vom Ort $\boldsymbol{r}$ im Kerninnern abhängt und am Kernrand kontinuierlich in das Nukleon-Nukleon-Potential im Außenraum übergehen muß, das sich jedoch in der Nähe des Kernrandes vom freien Nukleon-Nukleon-Potential unterscheidet (siehe Migdal [Mi 67], S. 12, 237 ff.).

Migdal verwendet folgende Interpolationsformel:

$$F = F_{\text{innen}} + (F_{\text{außen}} - F_{\text{innen}}) \frac{\rho(0) - \rho(\boldsymbol{r})}{\rho(0)}, \qquad \text{(XII.9)}$$

wobei ρ die Kerndichte darstellt. Für F_{innen} nimmt Migdal eine Zentralkraft an (vgl. Kap. IV):

$$F_{\text{innen}} = c\{f + f'\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 + g\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + g'\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2\}. \qquad \text{(XII.10)}$$

Zur Parametrisierung dieser Wechselwirkung geht man ganz ähnlich vor wie im Fall der Fermiflüssigkeit. Wir betrachten dazu den Fourierkoeffizienten von f, der sich wegen der Impulserhaltung folgendermaßen schreiben läßt:

$$f(\boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{p}_3 \boldsymbol{p}_4) = f(\boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_2 \boldsymbol{q}) \delta(\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_3 - \boldsymbol{p}_4). \qquad \text{(XII.11)}$$

Beschränkt man sich auf kleine Impulsübertragung $\boldsymbol{q}$ $(q \ll p_F)$, so kann f in niedrigster Näherung an der Stelle $q = 0$ angenommen werden. Dies führt uns auf die in Gleichung (XII.4) gegebene Form von f zurück. Entwickeln wir wieder nach Kugelfunktionen, so erhält man für F acht Parameter $f_0, f_1, f_0', f_1', g_0, g_1, g_0', g_1'$, die an das Experiment anzupassen

sind ($F_{\text{außen}}$ folgt aus Nukleon-Nukleon-Streudaten). Diese Parameter können aus dem Vergleich mit verschiedenen experimentellen Größen wie magnetisches Dipolmoment, elektrisches Quadrupolmoment, Symmetrieenergie, Isotopieverschiebung usf. gewonnen werden und sollten über einen weiten Massenbereich etwa konstant sein (siehe Migdal [Mi 67], S. 13ff.). Fig. 53 und Fig. 54 zeigen mit einem einzigen Satz von Parametern berechnete magnetische Momente und deren gute Übereinstimmung mit dem Experiment, insbesondere auch als Funktion der Massenzahl. Auch für andere Größen erhält man Werte, die teilweise stark von den Schalenmodellvorhersagen abweichen und experimentelle Daten besser wiedergeben.

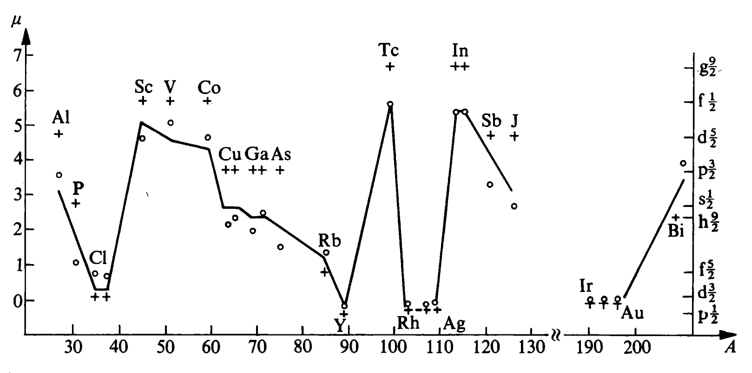


Fig. 53 Magnetische Momente sphärischer Kerne (ungerades Proton) nach der Migdal-Theorie (○ experimentelle Werte, + Werte von den Schmidt-Linien) (nach [Mi 63]).

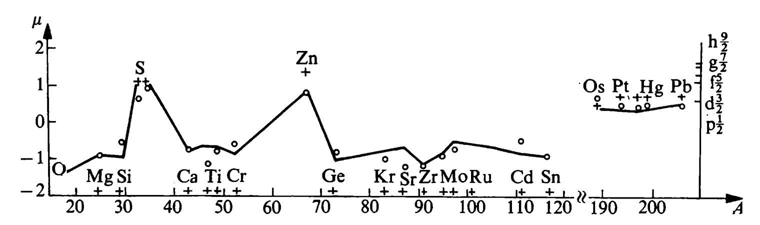


Fig. 54 Magnetische Momente sphärischer Kerne (ungerades Neutron) nach der Migdal-Theorie (○ experimentelle Werte, + Werte von den Schmidt-Linien) (nach [Mi 63]).

Die in diesem Abschnitt skizzierten Vorstellungen von der Struktur des Kerns liegen in allen früheren Kapiteln der Beschreibung des Kerns durch ein Schalenmodell und den sich daraus ergebenden Konsequenzen zugrunde.

ANHANG I: ZWEITE QUANTISIERUNG

1. Die Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren

Zur Beschreibung eines quantenmechanischen N-Teilchensystems (Fermi- bzw. Boseteilchen) bewährt sich ein Formalismus, den man als *zweite Quantisierung* oder Besetzungszahldarstellung bezeichnet. Er gestattet eine wesentliche Vereinfachung der Rechenarbeit und eine sehr kompakte Formulierung (insbesondere der Antisymmetrisierungsvorschrift des Pauliprinzips). Im folgenden wollen wir uns auf Fermisysteme beschränken, die bei der Beschreibung des Atomkerns eine besonders ausgezeichnete Rollen spielen. (Eine Erweiterung auf Bosesysteme ist ohne große Schwierigkeiten möglich.)

Bevor wir darangehen können, die Elemente der neuen Algebra, die *Feldoperatoren*, definieren zu können, müssen wir uns zunächst einige Voraussetzungen schaffen. Zu diesem Zweck führen wir eine Einteilchenbasis $\{q\}$ ein, die zu einem vollständigen Satz miteinander vertauschbarer Operatoren gehört, z. B.:

Ort, Spin, Isospin

$$|q\rangle = |x, y, z, m_s, \vartheta_3\rangle; \qquad \text{(AI. 1a)}$$

Impuls, Spin, Isospin

$$|q\rangle = |p_x, p_y, p_z, m_s, \vartheta_3\rangle; \qquad \text{(AI. 1b)}$$

Energie, Bahndrehimpuls, Spin, Isospin

$$|q\rangle = |n\, l\, m_l\, m_s, \vartheta_3\rangle; \qquad \text{(AI. 1c)}$$

Energie, Bahndrehimpulsquadrat, Gesamtdrehimpuls, Isospin

$$|q\rangle = |n\, l\, j\, m\, \vartheta_3\rangle. \qquad \text{(AI. 1d)}$$

Diese Einteilchenzustände seien vollständig

$$\sum_q |q\rangle\langle q| = 1 \qquad \text{(AI. 2)}$$

und orthonormiert:

$$\langle q'|q\rangle = \delta_{qq'}. \qquad \text{(AI. 3)}$$

(Für kontinuierliche Quantenzahlen, wie z.B. $\boldsymbol{r}$ und $\boldsymbol{p}$, soll das Kroneckersymbol in (AI.3) die Diracsche Deltafunktion $\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')$ und die Summe in (AI.2) das Integral $\int d^3q$ bedeuten.)

Die Ortsdarstellung des Zustandes $|q\rangle$ sei gegeben durch:

$$\langle \boldsymbol{r}|q\rangle = \varphi_q(\boldsymbol{r}). \tag{AI.4}$$

In einem wechselwirkungsfreien N-Fermionensystem besagt das Pauliprinzip, daß jeder Einteilchenzustand $|q\rangle$ nur entweder von einem Teilchen besetzt oder unbesetzt sein kann. Diese Forderung kann man mathematisch dadurch berücksichtigen, daß man die N-Fermionenwellenfunktion total antisymmetrisch gegen Vertauschung von Teilchen macht:

$$|q_1,q_2,\ldots,q_N\rangle = \mathscr{A}|q_1\rangle\otimes|q_2\rangle\otimes\cdots\otimes|q_N\rangle. \tag{AI.5}$$

Hierbei ist $\mathscr{A}$ der *Antisymmetrisierungsoperator*, den man in folgender Weise durch den *Permutationsoperator* P darstellen kann:

$$\mathscr{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P (-1)^P P, \tag{AI.6}$$

d.h. um einen total antisymmetrischen Zustand $|q_1,q_2,\ldots,q_N\rangle$ zu konstruieren, muß man, ausgehend von einer bestimmten Normalreihenfolge, alle hieraus durch eine beliebige Permutation erzeugten Produktzustände aufsummieren und zwar mit positivem Vorzeichen bei einer geraden Anzahl von Permutationen, mit negativem bei einer ungeraden Anzahl.

Für den in (AI.5) definierten N-Teilchenzustand kann man eine Reihe von Relationen herleiten. So berechnet sich sein Skalarprodukt mit $\mathscr{A}^2 = \sqrt{N!}\,\mathscr{A}$ aus (AI.5) und (AI.6) zu:

$$\langle q_1'\ldots q_N'|q_1\ldots q_N\rangle = \det|\langle q_i'|q_k\rangle|. \tag{AI.7}$$

Die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{q_1<q_2<\cdots<q_N} |q_1\ldots q_N\rangle\langle q_1\ldots q_N| \equiv \sum_{q_i}{}' |q_1\ldots q_N\rangle\langle q_1\ldots q_N| = 1, \tag{AI.8a}$$

bei der die Summation über alle q_i in der angegebenen Weise beschränkt ist (die q_i seien in einer beliebigen aber festen Reihenfolge geordnet) sowie die Relation

$$\sum_{q_1\ldots q_N} |q_1\ldots q_N\rangle\langle q_1\ldots q_N| = N!, \tag{AI.8b}$$

bei der ohne Beschränkung summiert wird, beweist man leicht, indem man mit (AI.7) folgende Identität verifiziert

$$\langle q'_1 \dots q'_N | \left\{ \sum_{q_i}{}' |q_1 \dots q_N\rangle \langle q_1 \dots q_N| - 1 \right\} |\rangle = 0, \qquad \text{(AI.8c)}$$

wobei $|\rangle$ ein beliebiger N-Teilchenzustand sein soll.

Insbesondere ist die Ortsdarstellung von $|q_1 \dots q_N\rangle$ gegeben durch

$$\langle \boldsymbol{x}_1 \dots \boldsymbol{x}_N | q_1 \dots q_N \rangle = \det |\varphi_{q_k}(\boldsymbol{x}_i)| \qquad \text{(AI.9)}$$

und heißt *Slaterdeterminante.* Multipliziert mit $1/\sqrt{N!}$ ist sie auf 1 normiert:

$$\frac{1}{N!} \int \det |\varphi^*_{q'_k}(\boldsymbol{x}_i)| \det |\varphi_{q_l}(\boldsymbol{x}_i)| \, \mathrm{d}^{3N}(x_1 \dots x_N) = \det |\langle q'_k | q_l \rangle| = \det |\delta_{q'_k q_l}|. \qquad \text{(AI.10)}$$

Die umgekehrte Relation beweist man mit (AI.8b) entsprechend:

$$\frac{1}{N!} \sum_{q_1 \dots q_N} \varphi^*_{q_1 \dots q_N}(\boldsymbol{x}_1 \dots \boldsymbol{x}_N) \varphi_{q_1 \dots q_N}(\boldsymbol{x}'_1 \dots \boldsymbol{x}'_N) = \det |\delta(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}'_k)|. \qquad \text{(AI.11)}$$

Als weitere Voraussetzung führen wir den sog. Fockraum $\mathscr{H}$ ein, der aus den Hilberträumen der Teilchenzahlen 0 bis ∞ aufgebaut ist:

$$\mathscr{H} = \{ \mathscr{H}_0, \mathscr{H}_1, \mathscr{H}_2, \dots, \mathscr{H}_N, \dots \}. \qquad \text{(AI.12)}$$

In $\mathscr{H}$ sei folgendes Skalarprodukt definiert:

$$\langle q'_1, \dots, q'_{N_1} | q_1, \dots, q_{N_2} \rangle = 0, \quad \text{für } N_1 \neq N_2. \qquad \text{(AI.13)}$$

Damit sind wir in der Lage, den Feldoperator $a^\dagger_q$ zu definieren:

$$a^\dagger_q | q_1, \dots, q_N \rangle = | q_1, \dots, q_N, q \rangle. \qquad \text{(AI.14)}$$

$a^\dagger_q$ ist ein *Erzeugungsoperator:* Er erzeugt in einem N-Fermionensystem, dessen total antisymmetrischer Zustand gekennzeichnet ist durch die Einteilchenzustände $q_1, \dots, q_N$, die mit je einem Teilchen besetzt sind (*Besetzungszahldarstellung*), ein weiteres Teilchen im Zustand q so, daß auch der neue $(N+1)$-Teilchen-Zustand total antisymmetrisch ist. Aus der Definition (AI.14) läßt sich mit (AI.13) die Wirkung des zu $a^\dagger_q$ hermitesch adjungierten Operators a_q ablesen:

$$\begin{aligned} a_q | q_1, \dots, q_N \rangle &= \sum_{q'_i}{}' \langle q'_1, \dots | a_q | q_1, \dots, q_N \rangle | q'_1, \dots \rangle \\ &= \sum_{q'_i}{}' \langle q_1, \dots, q_N | a^\dagger_q | q'_1, \dots, q'_{N-1} \rangle^* | q'_1, \dots, q'_{N-1} \rangle, \end{aligned} \qquad \text{(AI.15)}$$

d. h. wenn $a^\dagger_q$ ein Teilchen erzeugt, dann vernichtet a_q ein Teilchen.

Mit (AI.7) und (AI.14) kann man (AI.15) ausführen, indem man nach den Elementen der letzten Reihe der Determinante entwickelt:

$$a_q|q_1 \dots q_N\rangle = \delta_{q,q_N}|q_1 \dots q_{N-1}\rangle - \delta_{q,q_{N-1}}|q_1 \dots q_{N-2}\, q_N\rangle + - \cdots . \qquad \text{(AI.16)}$$

Damit können wir die Vertauschungsrelationen für die Feldoperatoren herleiten, indem wir bilden:

$$a_{q'}\, a_q^\dagger|q_1 \dots q_N\rangle = a_{q'}|q_1 \dots q_N\, q\rangle = \delta_{q',q}|q_1 \dots q_N\rangle - \delta_{q',q_N}|q_1 \dots q_{N-1}\, q\rangle + - \cdots \qquad \text{(AI.17)}$$

und

$$\begin{aligned} a_q^\dagger a_{q'}|q_1 \dots q_N\rangle &= a_q^\dagger(\delta_{q',q_N}|q_1 \dots q_{N-1}\rangle - \delta_{q',q_{N-1}}|q_1 \dots q_{N-2}\, q_N\rangle + - \cdots) \\ &= \delta_{q',q_N}|q_1 \dots q_{N-1}\, q\rangle - \delta_{q',q_{N-1}}|q_1 \dots q_{N-2}\, q_N\, q\rangle + - \cdots \end{aligned} \qquad \text{(AI.18)}$$

Addieren wir (AI.17) und (AI.18), so folgt:

$$a_{q'}\, a_q^\dagger + a_q^\dagger a_{q'} \equiv \{a_{q'}, a_q^\dagger\} = \delta_{q',q}. \qquad \text{(AI.19)}$$

Analog dazu erhalten wir:

$$\{a_{q'}, a_q\} = 0, \quad \{a_{q'}^\dagger, a_q^\dagger\} = 0. \qquad \text{(AI.20)}$$

Neben diesen *Fermivertauschungsregeln* folgt aus der Definition (AI.14) eine Relation, die einen total antisymmetrisierten N-Fermionenzustand durch das *Teilchenvakuum* $|0\rangle$ und die Feldoperatoren $a_{q_i}^\dagger$ ausdrückt:

$$|q_1 \dots q_N\rangle = a_{q_N}^\dagger a_{q_{N-1}}^\dagger \dots a_{q_1}^\dagger |0\rangle_0 = \left(\prod_{i=1}^{N} a_{q_i}^\dagger\right)|0\rangle_0 . \qquad \text{(AI.21)}$$

Außerdem beweist man leicht, in welcher Weise sich die Feldoperatoren, die zu einer bestimmten Darstellung $\{q\}$ gehören, durch die zu $\{s\}$ gehörenden ausdrücken

$$a_q = \sum_s \langle q|s\rangle\, a_s, \qquad \text{(AI.22a)}$$

$$a_q^\dagger = \sum_s \langle q|s\rangle^*\, a_s^\dagger, \qquad \text{(AI.22b)}$$

indem man die Identität

$$\begin{aligned} &\langle q_1 \dots | \{a_q - \sum_s \langle q|s\rangle\, a_s\} |\rangle \\ &= \sum_{s_i}{}' \langle q_1 \dots q_{N-1}| \left\{a_q - \sum_s \langle q|s\rangle\, a_s\right\} |s_1 \dots s_N\rangle \langle s_1 \dots s_N|\rangle = 0 \end{aligned} \qquad \text{(AI.22c)}$$

verifiziert und hierzu die Gleichheit der Beziehungen

$$\langle q_1 \dots q_{N-1} | a_q | s_1 \dots s_N \rangle = \langle q_1 \dots q_{N-1} q | s_1 \dots s_N \rangle, \qquad \text{(AI.22d)}$$

$$\langle q_1 \dots q_{N-1} | \sum_s \langle q | s \rangle a_s | s_1 \dots s_N \rangle$$

$$= \langle q | s_N \rangle \langle q_1 \dots q_{N-1} | s_1 \dots s_{N-1} \rangle - \langle q | s_{N-1} \rangle \langle q_1 \dots q_{N-1} | s_1 \dots s_{N-2} s_N \rangle + - \cdots \qquad \text{(AI.22e)}$$

durch die Entwicklung der Determinante in (AI.22d) nach den Gliedern der letzten Reihe zeigt.

2. *Darstellung von Ein- und Zweiteilchenoperatoren durch Feldoperatoren*

Einteilchenoperatoren. Ein Einteilchenoperator $F^{(1)}$, wie z. B. die kinetische Energie oder der Gesamtimpuls eines N-Teilchensystems, ist gegeben durch eine Summe aus N Operatoren f_i, die jeweils nur auf die Koordinaten des i-ten Teilchens wirken:

$$F^{(1)} = \sum_{i=1}^{N} f_i. \qquad \text{(AI.23a)}$$

Die Matrixelemente des Operators f sind in der Darstellung $\{q\}$ gegeben durch

$$f_{qq'} = \langle q | f | q' \rangle. \qquad \text{(AI.23b)}$$

Wir untersuchen jetzt die Wirkung des Operators

$$\sum_{qq'} f_{qq'} a_q^\dagger a_{q'}$$

auf einen beliebigen Zustand $|\rangle$ in der q-Darstellung:

$$\begin{aligned} \langle q_1, \dots, q_N | \sum_{qq'} f_{qq'} a_q^\dagger a_{q'} | \rangle &= \sum_{qq'} f_{qq'} \langle | a_{q'}^\dagger a_q | q_1, \dots, q_N \rangle^* \\ = \sum_{q'} \{ f_{q_N q'} \langle q_1, \dots, q_{N-1} q' | \rangle &+ f_{q_{N-1} q'} \langle q_1, \dots, q_{N-2} q' q_N | \rangle + \cdots \}. \end{aligned} \qquad \text{(AI.24)}$$

Benutzen wir die Darstellung

$$\langle q_1, \dots, q_N | F^{(1)} | q'_1, \dots, q'_N \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle q_i | f | q'_i \rangle \prod_{k \neq i} \delta_{q_k q'_k} \qquad \text{(AI.25)}$$

von $F^{(1)}$, dann lautet die Wirkung von $F^{(1)}$ auf $|\rangle$ in der q-Darstellung:

$$\langle q_1,\ldots,q_N|F^{(1)}|\rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{q'} \langle q_i|f|q'\rangle \langle q_1,\ldots,(q_i\to q'),\ldots,q_N|\rangle. \quad \text{(AI.26)}$$

Durch Vergleich mit (AI.24) zeigt sich, daß $F^{(1)}$, ausgedrückt durch Feldoperatoren, lautet:

$$F^{(1)} = \sum_{qq'} f_{qq'}\, a_q^\dagger a_{q'}. \quad \text{(AI.27)}$$

Wir wollen diesen Sachverhalt auf einige häufig vorkommende Einteilchenoperatoren anwenden:

Kinetische Energie (*Ortsdarstellung*)

$$T = \sum_{i=1}^{N} t_i, \quad \text{(AI.28)}$$

$$\langle \boldsymbol{x}|t|\boldsymbol{x}'\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \quad \text{(AI.29)}$$

$$\langle \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N| \int -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{x}} a^\dagger(\boldsymbol{x}) a(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x|\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\Delta_{\boldsymbol{x}_i}\langle \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N|\rangle. \quad \text{(AI.30)}$$

Kinetische Energie (Impulsdarstellung)

$$\langle \boldsymbol{p}|t|\boldsymbol{p}'\rangle = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} \quad \text{(periodische Randbedingungen)}, \quad \text{(AI.31)}$$

$$\langle \boldsymbol{p}_1,\ldots,\boldsymbol{p}_N|\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}|\rangle = \sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}\langle \boldsymbol{p}_1,\ldots,\boldsymbol{p}_N|\rangle. \quad \text{(AI.32)}$$

Gesamtimpuls

$$\boldsymbol{P} = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{p}_i, \quad \text{(AI.33)}$$

$$\langle \boldsymbol{p}_1,\ldots,\boldsymbol{p}_N|\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}\, a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}|\rangle = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{p}_i\langle \boldsymbol{p}_1,\ldots,\boldsymbol{p}_N|\rangle. \quad \text{(AI.34)}$$

Einteilchendichte (vgl. auch Anhang III)

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{x}}_i) \equiv \sum_{i=1}^{N} d_i \quad \text{(AI.35)}$$

($\hat{\boldsymbol{x}}_i$ ist der Ortsoperator des i-ten Teilchens, $\boldsymbol{r}$ ist eine Zahl).

$$\langle q|d|q'\rangle = \langle q|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{x}})|q'\rangle, \quad \text{(AI.36)}$$

$$\langle \boldsymbol{x}|d|\boldsymbol{x}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \quad \text{(AI.37)}$$

$$\int \langle \boldsymbol{x}|d|\boldsymbol{x}'\rangle a^\dagger(\boldsymbol{x}) a(\boldsymbol{x}') \mathrm{d}^3 x\, \mathrm{d}^3 x' = a^\dagger(\boldsymbol{r}) a(\boldsymbol{r}), \quad \text{(AI.38)}$$

$$\langle \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N | a^\dagger(\boldsymbol{r}) a(\boldsymbol{r}) | \rangle = \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{x}}_i) \langle \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N | \rangle, \tag{AI.39}$$

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = a^\dagger(\boldsymbol{r}) a(\boldsymbol{r}). \tag{AI.40}$$

Teilchenzahl

Die Teilchenzahl ist gegeben durch das Integral über die mittlere Teilchendichte am Ort $\boldsymbol{r}$:

$$\hat{N} = \int \hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3 r. \tag{AI.41}$$

In einer beliebigen Darstellung hat der Teilchenzahloperator $\hat{N}$ die Form:

$$\hat{N} = \sum_{qq'} \int \mathrm{d}^3 r \langle \boldsymbol{r} | q \rangle^* \langle \boldsymbol{r} | q' \rangle a_q^\dagger a_{q'} = \sum_q a_q^\dagger a_q. \tag{AI.42}$$

Zweiteilchenoperatoren. Ein Zweiteilchenoperator $F^{(2)}$ besteht aus einer Summe von Operatoren f_{ij}, die jeweils auf die Koordinaten zweier Teilchen wirken:

$$F^{(2)} = \sum_{i<j=1}^{N} f_{ij}. \tag{AI.43}$$

Um $F^{(2)}$ analog zu $F^{(1)}$ durch Feldoperatoren auszudrücken, bedienen wir uns der in (AI.35) definierten Einteilchendichte $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ und bilden:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \hat{\rho}(\boldsymbol{r}') = \sum_{i,j=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{x}}_i) \delta(\boldsymbol{r}'-\hat{\boldsymbol{x}}_j). \tag{AI.44}$$

Weiter gilt folgende Beziehung:

$$\tfrac{1}{2} \int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \hat{\rho}(\boldsymbol{r}') \mathrm{d}^3 r \, \mathrm{d}^3 r' = \tfrac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} v(\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j), \tag{AI.45}$$

wobei die rechte Seite dieser Gleichung bis auf den Term mit $i=j$ ein lokales Zweiteilchenpotential (als Beispiel für einen Zweiteilchenoperator) darstellt. Den Operator $\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \hat{\rho}(\boldsymbol{r}')$ kann man mit (AI.40) durch Feldoperatoren ausdrücken:

$$a^\dagger(\boldsymbol{r}) a^\dagger(\boldsymbol{r}') a(\boldsymbol{r}') a(\boldsymbol{r}) = \hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \hat{\rho}(\boldsymbol{r}') - \hat{\rho}(\boldsymbol{r}) \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{AI.46}$$

Eingesetzt in (AI.45) folgt damit:

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2} \int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') a^\dagger(\boldsymbol{r}) a^\dagger(\boldsymbol{r}') a(\boldsymbol{r}') a(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}^3 r \, \mathrm{d}^3 r' &= \tfrac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} v(\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j) - \tfrac{1}{2} v(0) N \\ &= \tfrac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N} v(\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j), \end{aligned} \tag{AI.47}$$

d.h. die linke Seite von (AI.47) hat in Ortsdarstellung genau die Form eines Zweiteilchenoperators, geschrieben in Feldoperatoren. Ausgedrückt durch Feldoperatoren $a_k^\dagger, a_k$, die zu einer beliebigen Basis von Einteilchenfunktionen $\{k\}$ gehören, lautet das Zweiteilchenpotential unter Benutzung von (AI.22a,b):

$$V=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N} v(\hat{x}_i-\hat{x}_j)=\frac{1}{2}\sum_{k_1\ldots k_4} v_{k_1k_2,k_3k_4}\, a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} \qquad \text{(AI.48a)}$$

mit

$$v_{k_1k_2,k_3k_4}=\int \langle \boldsymbol{r}|k_1\rangle^* \langle \boldsymbol{r}'|k_2\rangle^* v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\langle \boldsymbol{r}'|k_3\rangle\langle \boldsymbol{r}|k_4\rangle\, \mathrm{d}^3 r\, \mathrm{d}^3 r'. \qquad \text{(AI.48b)}$$

In derselben Weise ist natürlich auch jeder andere Zweiteilchenoperator im Formalismus der zweiten Quantisierung zu schreiben.

3. Regeln für das Rechnen mit Feldoperatoren

Nachdem die Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren und die Form von Ein- und Mehrteilchenoperatoren in der zweiten Quantisierung hergeleitet sind, kann man noch einige Regeln für das Rechnen in diesem Formalismus angeben.

Wicksches Theorem. Dazu definieren wir das *zeitgeordnete Produkt* von Feldoperatoren, in dem die Feldoperatoren so umgeordnet sind, daß die Zeitargumente von rechts nach links zunehmen. Bei einer ungeraden Permutation tritt ein Minuszeichen auf:

$$\mathrm{T}\{a(t_1)a^\dagger(t_3)a(t_2)a^\dagger(t_4)\}=-a(t_1)a(t_2)a^\dagger(t_3)a^\dagger(t_4), \qquad \text{(AI.49a)}$$

$$t_1>t_2>t_3>t_4. \qquad \text{(AI.49b)}$$

In einem *Normalprodukt* sind die Feldoperatoren so geordnet, daß alle Erzeugungsoperatoren links von allen Vernichtungsoperatoren stehen, wobei wiederum bei einer ungeraden Permutation ein Minuszeichen auftritt:

$$\mathrm{N}\{a_q a_p a_r a_s^\dagger\}=-a_s^\dagger a_q a_p a_r. \qquad \text{(AI.50)}$$

Unter der *Kontraktion* $\overparen{UV}$ zweier Feldoperatoren U und V versteht man folgende Größe:

$$\overparen{UV}=\mathrm{T}\{UV\}-\mathrm{N}\{UV\}. \qquad \text{(AI.51)}$$

Mit diesen Definitionen lautet das *Wicksche Theorem:*

$$
\begin{aligned}
\mathrm{T}\{UVW\ldots XYZ\} = {} & \mathrm{N}\{UVW\ldots XYZ\} + \mathrm{N}\{\overbrace{UV}W\ldots XYZ\} \\
& + \cdots + \mathrm{N}\{UVW\ldots X\overbrace{YZ}\} + \mathrm{N}\{\overbrace{UV}W\ldots \overbrace{XY}Z\} \\
& + \cdots + \mathrm{N}\{\overbrace{UV}\,\overbrace{W\ldots X}\,\overbrace{YZ}\} + \cdots
\end{aligned}
\tag{AI.52}
$$

In Worten:

Das zeitgeordnete Produkt einer Reihe von Feldoperatoren ist gleich dem normalgeordneten Produkt plus dem Normalprodukt mit einer Kontraktion, die auf alle möglichen Weisen zu wählen ist plus dem Normalprodukt mit zwei Kontraktionen plus usf., wobei zu berücksichtigen ist, daß bei Entfernung der Kontraktionen aus dem jeweiligen Normalprodukt ein Vorzeichenwechsel vorzunehmen ist, falls dazu eine ungerade Anzahl von Permutationen nötig ist, z.B.:

$$
\mathrm{N}\{\overbrace{UV}XY\} = \overbrace{UV}\,\mathrm{N}\{XY\}, \qquad \mathrm{N}\{\overbrace{UVX}Y\} = -\overbrace{UX}\,\mathrm{N}\{VY\} \tag{AI.53}
$$

(Für den Beweis des Wickschen Theorems siehe z.B. Thouless [Th 64], S. 55.)

Anwendungen. Hierzu beachten wir, daß zu jedem Vernichtungsoperator a ein Vakuumszustand definiert ist durch die Beziehung

$$
a|\mathrm{Vak}\rangle = 0. \tag{AI.54}
$$

Vernichtet z.B. $a = a_q$ ein *Teilchen* im Zustand $|q\rangle$, dann ist $|\mathrm{Vak}\rangle$ das Teilchenvakuum $|0\rangle_0$:

$$
a_q|0\rangle_0 = 0. \tag{AI.55}
$$

Ist $a = \alpha_q$ der Vernichtungsoperator eines *BCS-Quasiteilchens* mit

$$
\alpha_q = u_q a_q - v_q a^{\dagger}_{-q}, \tag{AI.56}
$$

so ist $|\mathrm{Vak}\rangle$ gleich dem BCS-Grundzustand:

$$
\alpha_q|\mathrm{BCS}\rangle = 0. \tag{AI.57}
$$

Haben die Parameter u_q, v_q spezielle Werte

$$
u_q = \begin{cases} 1, & \text{für } q \text{ unbesetzt,} \\ 0, & \text{für } q \text{ besetzt;} \end{cases} \tag{AI.58}
$$

$$
v_q = \begin{cases} 0, & \text{für } q \text{ unbesetzt,} \\ 1, & \text{für } q \text{ besetzt,} \end{cases} \tag{AI.59}
$$

so entstehen aus (AI.56) *Hartree-Fock-Quasiteilchen* mit

$$
\alpha_q|\mathrm{HF}\rangle = 0. \tag{AI.60}
$$

Wegen (AI. 55), (AI. 57) oder (AI. 60) liefert das Wicksche Theorem folgende Rechenregeln zur Bestimmung von Grundzustandserwartungswerten:

Der Grundzustandserwartungswert eines zeitgeordneten Produkts von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist gleich dem Anteil der rechten Seite von (AI. 52), *bei dem alle Operatoren auf alle mögliche Arten kontrahiert sind, nachdem zuvor eventuell* (AI. 57), (AI. 60) *auf Quasiteilchen transformiert worden ist.*

Treten zeitunabhängige Feldoperatoren auf, deren Reihenfolge in einem Matrixelement festgelegt ist (z. B. die Wechselwirkung mit $a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta$ oder ein Teilchen-Loch-Erzeugungsoperator $a_m^\dagger a_j$), so ist diese Ordnung als zeitgeordnet zu definieren. Kontraktionen von zeitunabhängigen Feldoperatoren haben eine besonders einfache Form:

$$\widehat{a_q^\dagger a_{q'}^\dagger} = a_q^\dagger a_{q'}^\dagger - \mathrm{N}\{a_q^\dagger a_{q'}^\dagger\} = 0, \qquad \text{(AI. 61a)}$$

$$\widehat{a_q a_{q'}} = a_q a_{q'} - \mathrm{N}\{a_q a_{q'}\} = 0, \qquad \text{(AI. 61b)}$$

$$\widehat{a_q^\dagger a_{q'}} = a_q^\dagger a_{q'} - \mathrm{N}\{a_q^\dagger a_{q'}\} = 0, \qquad \text{(AI. 61c)}$$

$$\widehat{a_q a_{q'}^\dagger} = a_q a_{q'}^\dagger - \mathrm{N}\{a_q a_{q'}^\dagger\} = \delta_{qq'}. \qquad \text{(AI. 61d)}$$

ANHANG II: ABLEITUNG DES WIRKUNGSQUERSCHNITTES FÜR DEN KERNPHOTOEFFEKT

Der Kernphotoeffekt läßt sich durch den in Fig. 55 veranschaulichten Prozeß darstellen. Es fällt dabei ein γ-Quant mit dem Impuls $\hbar \boldsymbol{k}^0$ auf einen Kern mit dem Impuls $\boldsymbol{p}^0$ ein und wird unter Emission eines Nukleons mit Impuls $\boldsymbol{q}'$ vernichtet. Der Restkern habe den Impuls $\boldsymbol{p}'$. (Im allgemeinen werden keine scharfen Impulse, sondern nur Impulsverteilungen beobachtet; siehe unten.)

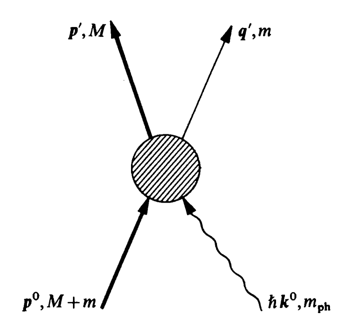


Fig. 55 Kernphotoeffekt.

Entwickelt man den Gesamtzustand $|\Psi(t)\rangle$ des Systems nach den Eigenzuständen $|i\rangle$ des vollen Hamiltonoperators ohne elektromagnetische Wechselwirkung

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t)|i\rangle, \tag{AII.1}$$

so ergibt sich in 1. Diracscher Störungstheorie für die Übergangswahrscheinlichkeit aus einem Anfangszustand $|p^0,k^0\rangle$ in einen Endzustand $|p',q'\rangle$:

$$|c^{p^0 k^0}_{p' q'}(t)|^2/t = \frac{2\pi}{\hbar}|T_{p'q',p^0k^0}|^2\,\delta(E_{p'q'} - E_{p^0} - \hbar\omega_{k^0}). \tag{AII.2}$$

Die einzelnen Größen sind dabei gegeben durch (vgl. Kap. II):

$$T_{p'q',p^0k^0} = \langle p'q'| - \frac{e}{mc} \sum_{n=1}^{Z} p_n A(r_n) | p^0 k^0 \rangle, \tag{AII.3}$$

$$E_{p^0} = E_0 + \frac{p^{0^2}}{2(M+m)}, \quad E_{p'q'} = E'_0 + \frac{p'^2}{2M} + \frac{q'^2}{2m}, \quad E'_0 = E_0 + b > E_0. \tag{AII.4}$$

Hierbei bedeuten E_0 und E'_0 die Grundzustandsenergien des Anfangs- bzw. Endkerns und b ist die Bindungsenergie des herausgeschlagenen Nukleons. Die Reaktionspartner seien im Eingangskanal durch ihre Wellenpakete festgelegt und der γ-Strahl in z-Richtung polarisiert:

$$|p^0, k^0\rangle \equiv \int d^3k\, d^3p\, \varphi(k^0, k)\varphi(p^0, p)|p, k\rangle, \quad |p, k\rangle \equiv a^{\dagger}_{k,z}|p, 0\rangle. \tag{AII.5a}$$

In Ortsdarstellung lauten die Kernwellenfunktionen:

$$\langle r_1, \ldots, r_A|p\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot R}}{(2\pi)^{3/2}} \Psi_0(i, \xi), \; i = 1, \ldots, 3A-3, \; \xi = 1, \ldots, 2A. \tag{AII.5b}$$

Dabei stellt R die Schwerpunktkoordinate

$$R = \frac{1}{A} \sum_{n=1}^{A} r_n \tag{AII.5c}$$

dar, i bezieht sich auf die $3A-3$ inneren Ortsvariablen und ξ auf die Gesamtheit der $2A$ Spin- und Isospinvariablen. Ebenso erhält man für die Ortsdarstellung der Endkonfiguration:

$$|p', q'\rangle \equiv |p', q' 0\rangle,$$

$$\langle r_1, \ldots, r_A|p', q'\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p' \cdot R' + q' \cdot r')}}{(2\pi)^3} \Psi'_0(i', \xi), \quad i' = 1, \ldots, 3(A-1)-3, \tag{AII.6}$$

$$R' = \frac{1}{A-1} \sum_{n=1}^{A-1} r_n.$$

Das Übergangsmatrixelement T läßt sich mit (AII.5a) folgendermaßen schreiben:

$$T_{p'q',p^0k^0} = \int d^3k\, d^3p\, \varphi(k^0, k)\, \varphi(p^0, p)\, t_{p'q',pk}. \tag{AII.7}$$

Mit der Besetzungszahldarstellung des Vektorpotentials (analog zu (II.46)):

$$A(r) = \frac{\hbar c}{2\pi} \sum_{\mu} \int d^3q \frac{e_{q,\mu}}{\sqrt{\hbar\omega_q}} [e^{iq \cdot r} a_{q,\mu} + \text{h.k.}] \tag{AII.8}$$

ist $t_{p'q',pk}$ gegeben durch:

$$t_{p'q',pk} = -\frac{e\hbar}{m}\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega_k}}\langle p'q'|\sum_{n=1}^{Z} e_{k,z}\cdot p_n e^{\frac{i}{\hbar}k\cdot r_n}|p\rangle. \qquad \text{(AII.9)}$$

Für vom Impuls und von Austauschmischungen unabhängige Zweiteilchenpotentiale läßt sich folgende Beziehung verifizieren:

$$p = \frac{m}{i\hbar}[r, H]. \qquad \text{(AII.10)}$$

Hiermit erhält man dann:

$$t_{p'q',pk} = i\frac{e}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega_k}}(E_p - E_{p'q'})\hat{t}_{p'q',pk}, \qquad \text{(AII.11)}$$

$$\hat{t}_{p'q',pk} = \frac{1}{(2\pi)^{9/2}}\sum_{\xi}\int e^{-\frac{i}{\hbar}(p'\cdot R' + q'\cdot r')}\Psi_0'^*(i',\xi)\sum_{n=1}^{Z} z_n e^{\frac{i}{\hbar}k\cdot r_n} e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot R}\Psi_0(i,\xi)$$
$$\times d^3r_1 \dots d^3r_A. \qquad \text{(AII.12)}$$

Wir transformieren nun auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (Fig. 56).

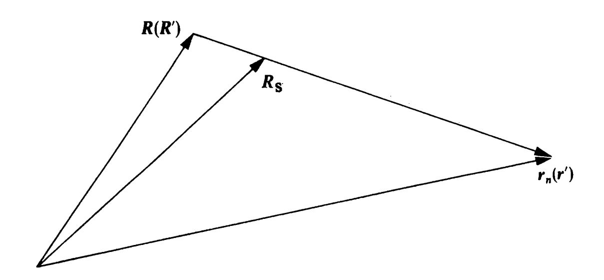


Fig. 56 Schwerpunkt des Systems vor und nach dem Stoß.

$$R_S = \frac{(M+m)R + m_{ph} r_n}{M + m + m_{ph}},$$

$$r_n = R_S + \frac{r_n - R}{M + m + m_{ph}}(M+m), \quad R = R_S + \frac{R - r_n}{M + m + m_{ph}} m_{ph}.$$

Mit $m_{\text{ph}} \ll m$ folgt:

$$\boldsymbol{r}_n \simeq \boldsymbol{R}_S + \boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{R}, \qquad \boldsymbol{R} \simeq \boldsymbol{R}_S, \tag{AII.13}$$

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{R}_S + \frac{\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{R}'}{M+m} M, \quad \boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R}_S + \frac{\boldsymbol{R}' - \boldsymbol{r}'}{M+m} m. \tag{AII.14}$$

($\boldsymbol{R}_S$ = Gesamtschwerpunkt des Systems,
$\boldsymbol{R}$ = Schwerpunkt des A-Nukleonensystems,
$\boldsymbol{R}'$ = Schwerpunkt des $(A-1)$-Nukleonensystems,
$\boldsymbol{r}_n$ = Ort des Photons,
$\boldsymbol{r}'$ = Ort des emittierten Nukleons).

Damit ergibt sich:

$$\hat{t}_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\xi} \int \Psi_{\boldsymbol{k}'}^*(i,\xi) \sum_{n=1}^{Z} z_n \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{R})} \Psi_0(i,\xi) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot \boldsymbol{R}_S} \mathrm{d}^3 r_1 \ldots \mathrm{d}^3 r_A, \tag{AII.15}$$

$$\boldsymbol{k}' = \mu\left(\frac{\boldsymbol{p}'}{M} - \frac{\boldsymbol{q}'}{m}\right), \quad \mu = \frac{Mm}{M+m}, \quad \boldsymbol{P}' = \boldsymbol{p}' + \boldsymbol{q}', \quad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{p},$$

$$\Psi_{\boldsymbol{k}'}(i,\xi) = \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{R}'-\boldsymbol{r}')}}{(2\pi)^{3/2}} \Psi_0'(i',\xi). \tag{AII.16}$$

Wir wollen uns in Zukunft auf Absorption von Dipolstrahlung beschränken und nehmen dazu von der Entwicklung der ebenen Welle nach Potenzen von $\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{R})$ nur den ersten Term mit (dies führt beim Dipol auf das gleiche Ergebnis wie die in Kap. II besprochene Entwicklung nach Multipolen; für höhere Ordnungen ist dieses Vorgehen nicht zweckmäßig). Weiter werden wir für die Zustände Ψ_0 und $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ die Schalenmodellnäherung verwenden und haben dazu, um Geisterzustände zu vermeiden, z_n durch $z_n - R_z$ zu ersetzen (s. Kap. I). Wir erhalten somit:

$$\hat{t}_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}} = \langle \boldsymbol{k}' | D_z | 0 \rangle \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot \boldsymbol{R}_S} \mathrm{d}^3 R_S, \tag{AII.17}$$

$$\langle \boldsymbol{k}' | D_z | 0 \rangle = \int \Psi_{\boldsymbol{k}'}^*(i,\xi) D_z(i) \Psi_0(i,\xi) \mathrm{d}(i) \mathrm{d}\xi, \tag{AII.18}$$

$$\boldsymbol{D} = \frac{NZ}{A}(\boldsymbol{R}_{\mathrm{p}} - \boldsymbol{R}_{\mathrm{n}}) = \frac{NZ}{A}\left[\frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{Z} \boldsymbol{r}_i - \frac{1}{N}\sum_{i=Z+1}^{A} \boldsymbol{r}_i\right].$$

Unter der Annahme, daß die ankommenden Wellenpakete sehr stark konzentriert sind, lautet das Übergangsmatrixelement näherungsweise:

$$T_{p'q',p^0k^0} = \mathrm{i}\frac{e}{2\pi}\int \mathrm{d}^3k\,\mathrm{d}^3p\,\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega_k}}(E_p - E_{p'q'})\langle k'|D_z|0\rangle\,\delta(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\,\varphi(\boldsymbol{k}^0,\boldsymbol{k})\,\varphi(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p})$$

$$\simeq \mathrm{i}\frac{e}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\hbar\omega_{k^0}}}(E_{p^0}-E_{p'q'})\langle k'|D_z|0\rangle\int \mathrm{d}^3k\,\mathrm{d}^3p\,\delta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}-\boldsymbol{P}')\,\varphi(\boldsymbol{k}^0,\boldsymbol{k})\,\varphi(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}). \qquad \text{(AII.19)}$$

Die Wahrscheinlichkeit $\mathrm{d}W$, den Endkern im Impulsbereich d^3p' und das emittierte Nukleon in d^3q' zu finden, ist damit gegeben durch:

$$\mathrm{d}W = \frac{2\pi}{\hbar}\,|T_{p'q',p^0k^0}|^2\,\delta(E_{p'q'}-E_{p^0}-\hbar\omega_{k^0})\,\mathrm{d}^3p'\,\mathrm{d}^3q'. \qquad \text{(AII.20)}$$

Durch folgende Transformation

$$\boldsymbol{k}^{(0)}\to\boldsymbol{k}^{(0)} - \frac{k^{(0)}}{c}\boldsymbol{v},\quad \boldsymbol{p}^{(0)}\to\boldsymbol{p}^{(0)}-(M+m)\boldsymbol{v},\quad \boldsymbol{q}'\to\boldsymbol{q}'-m\boldsymbol{v},\quad \boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}'-M\boldsymbol{v} \qquad \text{(AII.21)}$$

darf sich $\mathrm{d}W$ nicht ändern (Galileiinvarianz), und wir können speziell $\boldsymbol{v}$ so wählen, daß sich die Schwerpunktsgeschwindigkeit des Ausgangskanals zu Null ergibt:

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}'}{M+m}.$$

Berücksichtigen wir weiter, daß $\mathrm{d}^3p'\,\mathrm{d}^3q' = \mathrm{d}^3k'\,\mathrm{d}^3P'$, und integrieren über die Koordinate $\boldsymbol{P}'$, so folgt die Übergangswahrscheinlichkeit $\mathrm{d}w$:

$$\mathrm{d}w = \frac{e^2}{2\pi\hbar}\frac{1}{\hbar\omega_{k^0}}\left(\frac{k'^2}{2\mu}+b\right)^2|\langle k'|D_z|0\rangle|^2\,B\,\delta(k'^2/2\mu+b-\hbar\omega_{k^0})\,\mathrm{d}^3k', \qquad \text{(AII.22)}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{B} &= \int \mathrm{d}^3P'\left|\int \mathrm{d}^3k\,\mathrm{d}^3p\,\delta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}-\boldsymbol{P}')\,\varphi(\boldsymbol{k}^0,\boldsymbol{k})\,\varphi(\boldsymbol{p}^0-\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{q}',\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{q}')\right|^2 \\ &= \int \mathrm{d}^3P'\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r'\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{P}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\,\varphi_{\boldsymbol{k}^0}(\boldsymbol{r})\,\varphi_{\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q}'}(\boldsymbol{r})\,\varphi^*_{\boldsymbol{k}^0}(\boldsymbol{r}')\,\varphi^*_{\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q}'}(\boldsymbol{r}') \\ &= (2\pi)^3\int \mathrm{d}^3r\,|\varphi_{\boldsymbol{k}^0}(\boldsymbol{r})|^2\,|\varphi_{\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q}'}(\boldsymbol{r})|^2, \end{aligned} \qquad \text{(AII.23)}$$

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3p\,\varphi(\boldsymbol{p})\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}.$$

$|\varphi(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}^3r$ bedeutet die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Gebiet d^3r. Der Beitrag zu der Reaktion, der aus einem Raumgebiet

$\mathrm{d}V$ stammt, in dem die Dichte der Reaktionspartner der Anfangskonfiguration $\rho(\boldsymbol{k}^0)$ bzw. $\rho(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q}')$ ist, lautet:

$$\mathrm{d}w = \frac{(2\pi)^2 e^2}{\hbar}\left(\frac{\boldsymbol{k}'^2}{2\mu} + b\right)|\langle \boldsymbol{k}'|D_z|0\rangle|^2$$
$$\times \rho(\boldsymbol{k}^0)\rho(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q}')\mathrm{d}V\,\delta(k'^2/2\mu + b - \hbar\omega_{k_0})\mathrm{d}^3k'. \tag{AII.24}$$

Definiert man nun in üblicher Weise den Wirkungsquerschnitt als das Verhältnis der in den Bereich d^3k' gestreuten Reaktionspartner zur Stromdichte der einfallenden Teilchen und zur Dichte der beschossenen Teilchen, so erhält man:

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{(2\pi)^2 e^2}{\hbar c}\left(\frac{\boldsymbol{k}'^2}{2\mu} + b\right)|\langle \boldsymbol{k}'|D_z|0\rangle|^2\,\delta\left(\frac{\boldsymbol{k}'^2}{2\mu} + b - \hbar\omega_{k_0}\right)\mathrm{d}^3k'. \tag{AII.25}$$

Für den über alle Impulse $\boldsymbol{k}'$ integrierten Wirkungsquerschnitt ergibt sich:

$$\sigma_{\mathrm{tot}}(\omega) = 2\pi^2\frac{e^2}{\hbar mc}\sum_{\xi}\int f_{0,\boldsymbol{k}'}\,\delta(\boldsymbol{k}'^2/2\mu + b - \hbar\omega)\mathrm{d}^3k' + \cdots, \tag{AII.26}$$

$$f_{0,\boldsymbol{k}'} = 2m\left(\frac{\boldsymbol{k}'^2}{2\mu} + b\right)|\langle \boldsymbol{k}'|D_z|0\rangle|^2. \tag{AII.27}$$

$f_{0,\boldsymbol{k}'}$ wird als Dipolstärke bezeichnet, und Gleichung (AII.26) entspricht genau der in Kapitel VI, Abschnitt 3 angegebenen Beziehung, wenn man von den freien Zuständen $|\boldsymbol{k}'\rangle$ zu den gebundenen $|n\rangle$ übergeht.

ANHANG III: DICHTEMATRIZEN

1. Normale Dichten

Die Dynamik eines Vielteilchensystems läßt sich besonders bequem durch sog. *Dichtematrizen* beschreiben, wobei man Ein- und Mehrteilchendichtematrizen unterscheidet. Da für die in diesem Buch behandelten Probleme ausschließlich Einteilchendichtematrizen von Bedeutung sind, sei der Leser bezüglich höherer Dichtematrizen auf Thouless, Quantentheorie der Vielteilchensysteme, [Th 64], S. 21ff., verwiesen.

Wir definieren zunächst einen Einteilchenoperator $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ in einem N-Teilchen-Hilbertraum

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{x}_i) = \sum_{i=1}^{N} d_i \tag{AIII.1}$$

($\hat{\boldsymbol{x}}_i$ ist der Ortsoperator des i-ten Teilchens), der – durch Feldoperatoren ausgedrückt (vgl. Anhang I) – die Form hat:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \sum_{pq} d_{pq} a_p^\dagger a_q, \tag{AIII.2}$$

$$d_{pq} = \langle p|\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{x}})|q\rangle = \varphi_p^*(\boldsymbol{r})\,\varphi_q(\boldsymbol{r}), \tag{AIII.3}$$

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = a^\dagger(\boldsymbol{r})\,a(\boldsymbol{r}) \tag{AIII.4}$$

Bilden wir den Erwartungswert dieses Operators bezüglich eines normierten N-Teilchenzustandes $|\Psi\rangle$, so finden wir (unter Benutzung von Anhang I):

$$\begin{aligned} &\langle\Psi|\hat{\rho}(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle = \langle\Psi|a^\dagger(\boldsymbol{r})a(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle \\ &= \int \langle \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N|a^\dagger(\boldsymbol{r})a(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{x}_1',\ldots,\boldsymbol{x}_N'\rangle\, \Psi^*(\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N)\Psi(\boldsymbol{x}_1',\ldots,\boldsymbol{x}_N')\,\mathrm{d}^{3N}x\,\mathrm{d}^{3N}x' \\ &= N\int |\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{x}_2,\ldots,\boldsymbol{x}_N|^2\,\mathrm{d}^{3(N-1)}(x_2,\ldots,x_N). \end{aligned} \tag{AIII.5}$$

Daraus sehen wir, daß der Erwartungswert des Operators $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ in einem Zustand $|\Psi\rangle$ gerade die mittlere Teilchendichte am Ort $\boldsymbol{r}$ in diesem Zustand angibt. Integriert man (AIII.5) über den gesamten Raum, so wird die rechte Seite gleich der *Teilchenzahl* N des Systems.

(AIII.5) kann man andererseits auch als Diagonalelement eines Operators ρ_Ψ in Ortsdarstellung auffassen, den man in der Form

$$\langle r|\rho_\Psi|r'\rangle = N\int \Psi^*(r',x_2,\ldots,x_N)\,\Psi(r,x_2,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}^{3(N-1)}(x_2,\ldots,x_N) \quad \text{(AIII.6)}$$

als *Einteilchendichtematrix* bezeichnet. Mit (AIII.5) folgt sofort der Übergang in eine andere Darstellung:

$$\begin{aligned}\langle r|\rho_\Psi|r'\rangle &= \langle\Psi|a^\dagger(r')a(r)|\Psi\rangle\\ &= \sum_{pq}\varphi_p^*(r')\,\varphi_q(r)\langle\Psi|a_p^\dagger a_q|\Psi\rangle\\ &= \sum_{pq}\langle r|q\rangle\langle p|r'\rangle\langle\Psi|a_p^\dagger a_q|\Psi\rangle, \end{aligned} \quad \text{(AIII.7)}$$

wobei die Größe

$$(\rho_\Psi)_{qp} = \langle\Psi|a_p^\dagger a_q|\Psi\rangle \quad \text{(AIII.8)}$$

das Matrixelement des Einteilchendichteoperators

$$\rho_\Psi = \sum_{pq}|q\rangle(\rho_\Psi)_{qp}\langle p| \quad \text{(AIII.9)}$$

in einer beliebigen Darstellung bedeutet.

Diese Einteilchendichte ρ_Ψ hat einige leicht einzusehende Eigenschaften:

a) Ist $|\Psi\rangle = |\Psi_\mathrm{D}\rangle$ eine Determinante, so ist die Einteilchendichte ρ_{Ψ_D} diagonal in den Einteilchenzuständen, aus denen $|\Psi_\mathrm{D}\rangle$ aufgebaut ist,

$$\langle\Psi_\mathrm{D}|a_q^\dagger a_p|\Psi_\mathrm{D}\rangle = \rho_p^0\,\delta_{pq}, \quad \text{(AIII.10)}$$

wobei die Eigenwerte ρ_p^0 entweder 0 oder 1 sind:

$$\rho_p^0 = \begin{cases}1, & \text{für } p \text{ besetzt,}\\ 0, & \text{für } p \text{ unbesetzt.}\end{cases} \quad \text{(AIII.11)}$$

In diesem Fall folgt aus (AIII.9) sofort

$$\rho_{\Psi_\mathrm{D}} = \sum_{p=1}^{N}|p\rangle\langle p|, \quad \text{(AIII.12)}$$

d.h., ρ_{Ψ_D} ist ein Projektionsoperator in einem Einteilchen-Hilbertraum

$$\rho_{\Psi\mathrm{D}}^2 = \rho_{\Psi\mathrm{D}}, \quad \text{(AIII.13)}$$

der auf den Unterraum der in $|\Psi_\mathrm{D}\rangle$ besetzten Zustände projiziert.

b) Ist $|\psi\rangle = |\mathrm{BCS}\rangle$, so ist ρ_BCS ebenfalls diagonal in den Einteilchenzuständen, aus denen $|\mathrm{BCS}\rangle$ aufgebaut ist, jedoch liegen jetzt die Diagonalelemente zwischen 0 und 1

$$(\rho_{\mathrm{BCS}})_{qp} = \langle \mathrm{BCS}|a_p^\dagger a_q|\mathrm{BCS}\rangle = v_p^2\,\delta_{pq}, \tag{AIII.14}$$

und

$$\rho_{\mathrm{BCS}} = \sum_p v_p^2 |p\rangle\langle p| \tag{AIII.15}$$

ist kein Projektionsoperator mehr.

c) Wegen (AIII.8) z.B. ist aber für ein ganz beliebiges $|\Psi\rangle$ die Dichte ρ_Ψ immer noch hermitesch

$$\rho_\Psi^\dagger = \rho_\Psi \tag{AIII.16}$$

und kann deshalb diagonalisiert werden

$$(\rho_\Psi)_{\mu\nu} = \rho_\Psi^\nu\,\delta_{\mu\nu}, \tag{AIII.17}$$

wobei, wie sich zeigen läßt, die Eigenwerte ρ_Ψ^ν zwischen 0 und 1 liegen.

d) Der Erwartungswert eines Einteilchenoperators

$$F^{(1)} = \sum_{pq} f_{pq}\,a_p^\dagger a_q \tag{AIII.18}$$

im Zustand $|\Psi\rangle$ läßt sich mit (AIII.8) als Spur schreiben:

$$\langle\Psi|F^{(1)}|\Psi\rangle = \sum_{pq} f_{pq}\langle\Psi|a_p^\dagger a_q|\Psi\rangle = \sum_{pq} f_{pq}(\rho_\Psi)_{qp} = \mathrm{Sp}(f\,\rho_\Psi). \tag{AIII.19}$$

2. *Verallgemeinerte Dichten*

Im Rahmen des Superflüssigkeitsmodells erweist es sich als nützlich, den Begriff der Einteilchendichtematrix zu verallgemeinern. Hierzu denken wir uns einen normierten Zustand $|\Psi\rangle$, der nicht mehr Eigenfunktion des Teilchenzahloperators ist (z.B. $|\mathrm{BCS}\rangle$) und definieren die anomale Dichte χ_Ψ durch ihre Ortsdarstellung:

$$\langle \boldsymbol{r}|\chi_\Psi|\boldsymbol{r}'\rangle = \langle\Psi|a(\boldsymbol{r}')a(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle \neq 0. \tag{AIII.20}$$

In Anhang IV ist gezeigt, daß sich χ_Ψ unter einer unitären Transformation U der Einteilchenbasis in folgender Weise transformiert:

$$\chi_\Psi \to U\,\chi_\Psi\,\tilde{U}. \tag{AIII.21}$$

Die Transformation der anomalen Dichte in eine beliebige Darstellung hat die Form:

$$\langle \boldsymbol{r}|\chi_\Psi|\boldsymbol{r}'\rangle = \sum_{pq}\langle \boldsymbol{r}'|q\rangle\langle \boldsymbol{r}|p\rangle\langle\Psi|a_q a_p|\Psi\rangle. \tag{AIII.22}$$

Betrachten wir jetzt den Fall

$$|\Psi\rangle = |\mathrm{BCS}\rangle, \tag{AIII.23}$$

so sehen wir, daß χ_{BCS} in der Darstellung der Zustände, aus denen $|\text{BCS}\rangle$ aufgebaut ist, die Form eines antisymmetrischen Tensors 2. Stufe hat:

$$\begin{aligned}\langle \text{BCS}|a_q a_p|\text{BCS}\rangle &= u_q v_p \delta_{q-p} \\ &= u_p v_p \delta_{q-p} \\ &= -u_q v_q \delta_{q-p}.\end{aligned} \tag{AIII.24}$$

($-p$ beschreibt den zu p zeitgespiegelten Zustand; vgl. Kapitel VII, (VII. 11 a)ff.). Hiermit und unter Benutzung des Zeitspiegelungsoperators K kann man die Ortsdarstellung der anomalen Dichte umformen

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}|\chi_{\text{BCS}}|\boldsymbol{r}'\rangle &= \sum_{pq} \langle \boldsymbol{r}'|q\rangle \langle \boldsymbol{r}|p\rangle u_q v_p \delta_{q-p} \\ &= \sum_p \langle \boldsymbol{r}'|-p\rangle \langle \boldsymbol{r}|p\rangle u_p v_p \\ &= \sum_p \langle \boldsymbol{r}'|(K|p\rangle)\langle \boldsymbol{r}|p\rangle u_p v_p \\ &= \sum_p \langle \boldsymbol{r}|p\rangle \langle p|(K|\boldsymbol{r}'\rangle) u_p v_p,\end{aligned} \tag{AIII.25}$$

d.h. wir können den Operator χ_{BCS} der anomalen Dichte in einer zu (AIII. 12) analogen Form schreiben:

$$\chi_{\text{BCS}} = \sum_p u_p v_p |p\rangle \langle p|(K \tag{AIII.26}$$

oder

$$\chi_{\text{BCS}} = -\sum_p u_p v_p (K|p\rangle \langle p|), \tag{AIII.27}$$

wobei die Konvention

$$(K|p\rangle \langle p|)|\,\rangle = (K|p\rangle)\langle p|\rangle^* \tag{AIII.28}$$

benutzt wurde. (Vgl. z.B. Messiah [Me 61], S. 632ff.)

Weder ρ_{BCS} noch χ_{BCS} sind nach dem obigen Projektionsoperatoren. Man kann jedoch leicht (z.B. mit (AIII. 14) und (AIII. 24)) zeigen, daß sie den Beziehungen

$$\rho_{\text{BCS}}^2 - \chi_{\text{BCS}} \chi_{\text{BCS}}^* = \rho_{\text{BCS}}, \tag{AIII.29a}$$

$$\rho_{\text{BCS}} \chi_{\text{BCS}} = \chi_{\text{BCS}} \rho_{\text{BCS}}^* \tag{AIII.29b}$$

genügen ($(A^*)_{kl} = \langle k|A|l\rangle^*$). Mit diesen Relationen kann man nach Bogolyubov [Bo 59] einen verallgemeinerten Dichteoperator

$$\mathcal{R}_{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} \rho_{\text{BCS}} & \chi_{\text{BCS}} \\ -\chi_{\text{BCS}}^* & 1-\rho_{\text{BCS}}^* \end{pmatrix} \tag{AIII.30}$$

definieren (siehe auch Valatin [Va 61]), der die Eigenschaften eines Projektionsoperators hat:

$$\mathscr{R}^2_{\mathrm{BCS}} = \mathscr{R}_{\mathrm{BCS}} \equiv \mathscr{R}^0. \tag{AIII.31}$$

Mit $\mathscr{R}^0$ und einer Matrix $\mathscr{H}^0$ lassen sich die in Kapitel VII hergeleiteten Hartree-Fock-Bogolyubov-Gleichungen (VII.82) in einer sehr komprimierten Form schreiben:

$$[\mathscr{H}^0, \mathscr{R}^0] = 0 \tag{AIII.32}$$

(für die Definition von $\mathscr{H}^0$ vergleiche (IX.45f, g)ff.), die analog zu der Form (VI.68) der Hartree-Fock-Gleichungen ist.

Ähnlich wie in Kapitel VI, Abschnitt 7, kann man auch hier für eine verallgemeinerte Dichte $\mathscr{R}$ eine Bewegungsgleichung

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\mathscr{R}} = [\mathscr{H}, \mathscr{R}] \tag{AIII.33}$$

herleiten (vgl. (IX.45c–g)), wobei man jedoch in der Zweiteilchenkorrelationsfunktion $\langle 0|a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a_\gamma a_\delta|0\rangle$ nun auch die „anomalen Kontraktionen" $\langle aa\rangle$ und $\langle a^\dagger a^\dagger\rangle$ berücksichtigen muß. Eine gegenüber dieser Methode elegantere Herleitung von (AIII.33) schlägt Valatin [Va 61] vor, indem er die Beziehung $\mathscr{R}^{02} = \mathscr{R}^0$ auf die Dichte $\mathscr{R}$ erweitert (eine zu der Zerspaltung der Zweiteilchenkorrelationsfunktion äquivalente Näherung)

$$\mathscr{R}^2 = \mathscr{R} \tag{AIII.34}$$

und mit dieser Nebenbedingung den Grundzustandserwartungswert von $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H$ variiert (H ist der exakte Hamiltonoperator.)

ANHANG IV: TRANSFORMATION INS ROTIERENDE BEZUGSSYSTEM IM RAHMEN DES VERALLGEMEINERTEN ZEITABHÄNGIGEN HARTREE-FOCK-VERFAHRENS

Um analog zur Herleitung des *Coriolisterms* $-\hbar\omega J_x$ in der gewöhnlichen zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie (vgl. Kapitel IX, (IX.19) bis (IX.22)) die Transformation ins rotierende System auch unter Einschluß von Paarungseffekten durchführen zu können, diskutieren wir zunächst, in welcher Weise sich normale Dichte ρ und anomale Dichte χ bei einer Transformation vom ruhenden in das rotierende Bezugssystem transformieren.

Nach (AI.22a, b) lautet ein solcher Basiswechsel für die Feldoperatoren:

$$a_p = \sum_q U_{pq} \bar{a}_q, \tag{AIV.1}$$

$$a_p^\dagger = \sum_q \bar{a}_q^\dagger U_{qp}^\dagger. \tag{AIV.2}$$

Hierbei vernichtet $\bar{a}_q$ ein Teilchen im Zustand $|q\rangle$ im rotierenden Bezugssystem, a_p vernichtet ein Teilchen im Zustand $|p\rangle$ im ruhenden Bezugssystem. (Analog für $\bar{a}_q^\dagger$ und $a_p^\dagger$.)

Damit können wir sofort die Transformationseigenschaften der Dichten ρ und χ angeben:

$$\rho_{pp'} = \langle a_{p'}^\dagger a_p \rangle = \sum_{qq'} \langle \bar{a}_{q'}^\dagger \bar{a}_q \rangle U_{q'p'}^\dagger U_{pq} = \sum_{qq'} U_{pq} \bar{\rho}_{qq'} U_{q'p'}^\dagger, \tag{AIV.3}$$

d.h.

$$\rho = U \bar{\rho} U^\dagger; \tag{AIV.4}$$

$$\chi_{pp'} = \langle a_{p'} a_p \rangle = \sum_{qq'} \langle \bar{a}_{q'} \bar{a}_q \rangle U_{p'q'} U_{pq} = \sum_{qq'} U_{pq} \bar{\chi}_{qq'} \tilde{U}_{q'p'}, \tag{AIV.5}$$

d. h.

$$\chi = U \bar{\chi} \tilde{U}. \tag{AIV.6}$$

Hierbei ist $U^\dagger$ der zu U hermitesch adjungierte, $\tilde{U}$ der zu U transponierte Operator mit folgenden Matrixelementen:

$$(U^\dagger)_{pq} = (U)_{qp}^*, \tag{AIV.7a}$$

$$(\tilde{U})_{pq} = U_{qp}. \tag{AIV.7b}$$

Nach (IX.45b) lautet die verallgemeinerte Dichtematrix $\mathcal{R}$:

$$\mathcal{R}=\begin{pmatrix} \rho & \chi \\ -\chi^* & 1-\rho^* \end{pmatrix}. \tag{AIV.8}$$

Bis (AIV.7) waren die Überlegungen für jede unitäre Transformation U richtig. In dem uns interessierenden Fall der Transformation in ein z. B. um die x-Achse mit einer Kreisfrequenz ω rotierendes Bezugssystem hat U die spezielle Form (IX.20):

$$U=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}. \tag{AIV.9}$$

Damit folgt aus (AIV.4) und (AIV.6)

$$\rho=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\bar{\rho}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x}, \tag{AIV.10}$$

$$\chi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\bar{\chi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)}. \tag{AIV.11}$$

Definieren wir eine verallgemeinerte Transformationsmatrix $\mathcal{U}$:

$$\mathcal{U}=\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)} \end{pmatrix}, \tag{AIV.12}$$

so folgt durch eine einfache Rechnung

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}\bar{\mathcal{R}}\mathcal{U}^\dagger &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{\rho} & \bar{\chi} \\ -\bar{\chi}^* & 1-\bar{\rho}^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\bar{\rho}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_x}\bar{\chi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)}(-\bar{\chi}^*)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t J_x} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)}(1-\bar{\rho}^*)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t(-J_x^*)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \rho & \chi \\ -\chi^* & 1-\rho^* \end{pmatrix} = \mathcal{R},
\end{aligned} \tag{AIV.13}$$

d. h. die verallgemeinerte Transformation $\mathcal{U}$ transformiert unter Berücksichtigung der Transformationseigenschaften von ρ und χ die verallgemeinerte Dichte $\mathcal{R}$ vom rotierenden in das ruhende Bezugssystem.

Ganz analog zu (IX.19) benutzen wir jetzt die Bewegungsgleichung für $\mathcal{R}$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\mathcal{R}}=[\mathcal{H}, \mathcal{R}], \tag{AIV.14}$$

berechnen aus (AIV.13) $\dot{\mathcal{R}}$ und setzen es in (AIV.14) ein:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\mathcal{R}}=\mathrm{i}\hbar(-\mathrm{i}\omega)\begin{pmatrix} J_x & 0 \\ 0 & -J_x^* \end{pmatrix}\mathcal{R}+\mathrm{i}\hbar\mathcal{U}\dot{\bar{\mathcal{R}}}\mathcal{U}^\dagger+\mathrm{i}\hbar(-\mathrm{i}\omega)\mathcal{R}\begin{pmatrix} J_x & 0 \\ 0 & -J_x^* \end{pmatrix}=[\mathcal{H},\mathcal{R}]. \tag{AIV.15}$$

Durch Multiplikation dieser Gleichung von links mit $\mathscr{U}^\dagger$ und von rechts mit $\mathscr{U}$ folgt:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\bar{\mathscr{R}}}+\hbar\omega\mathscr{L}\bar{\mathscr{R}}-\hbar\omega\bar{\mathscr{R}}\mathscr{L}=[\bar{\mathscr{H}},\bar{\mathscr{R}}] \tag{AIV.16}$$

mit

$$\mathscr{L}=\begin{pmatrix} J_x & 0 \\ 0 & -J_x^* \end{pmatrix}. \tag{AIV.17}$$

Die stationären Lösungen im rotierenden Bezugssystem genügen also der Gleichung

$$[\bar{\mathscr{H}}-\hbar\omega\mathscr{L},\bar{\mathscr{R}}]=0, \tag{AIV.18}$$

und der *verallgemeinerte Coriolisterm* hat die Form:

$$-\hbar\omega\mathscr{L}=-\hbar\omega\begin{pmatrix} J_x & 0 \\ 0 & -J_x^* \end{pmatrix}. \tag{AIV.19}$$

LITERATURVERZEICHNIS

[Al 56] Alder, K., Huus, T., Mottelson, B. R. und Winther, A.; Revs. Modern Phys. **28** (1956) 432 78

[An 63] Anderson, D. W., Bureau, A. J., Cook, B. C., Griffin, J. E., McConnell, J. R. und Nybo, K. H.; Phys. Rev. Letters **10** (1963) 250 106

[BB 60] Brown, G. E. und Bolsterli, M.; Phys. Rev. Letters **3** (1960) 472 .. 112

[BC 61] Brown, G. E., Castillejo, L. und Evans, J. A.; Nuclear Phys. **22** (1961) 1 110

[BCS 57] Bardeen, J., Cooper, L. N. und Schrieffer, J. R.; Phys. Rev. **108** (1957) 1175 .... 139, 150

[Be 59] Belyaev, S. T.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. **31** (1959) No. 11 .... 139, 154, 155, 162, 172

[BE 61] Brown, G. E., Evans, J. A. und Thouless, D. J.; Nuclear Phys. **24** (1961) 1 .... 112, 129

[BH 59] Brenig, W. und Haag, R.; Fortschritte Phys. **7** (1959) 183 219

[BM 53] Bohr, A. und Mottelson, B. R.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. **27** (1953) No. 19 .... 57, 72

[Bo 59] Bogolyubov, N. N.; Soviet Phys. Uspekhi **2** (1959) 236 (Uspekhi Fiz. Nauk **67** (1959) 549) 154, 256

[Br 59] Brown, G. E.; Revs. Modern Phys. **31** (1959) 893 ... 216, 220, 221, 227

[Br 64] Brown, G. E.; Unified Theory of Nuclear Models, North-Holland Publish. Comp., Amsterdam 1964 .... 108, 216

[Br 65] Brenig, W.; Advances Theor. Phys. **1** (1965) 59 106

[BS 61] Bès, D. und Szymanski, Z.; Nuclear Phys. **28** (1961) 42 ...... 172, 173

[BW 52] Blatt, J. M. und Weisskopf, V. M.; Theoretical Nuclear Physics, J. Wiley & Sons, New York 1952 46

[BW 60] Blomquist, J. und Wahlborn, S.; Arkiv f. Fysik **16** (1960) 545 . 26, 33

[Ca 66] Camiz, P., Covello, A. und Jean, M.; Nuovo Cimento **42B** (1966) 199 161

[CS 59] Condon, E. V. und Shortley, G. H.; The Theory of Atomic Spectra, Cambr. Univ. Press, New York 1959 141

[Da 56] Danos, M.; Bulletin Am. Phys. Soc., Ser. II, **1** (1956) 135 61

[Da 63] Davydov, A. S.; Theorie des Atomkerns, VEB Deutscher Verl. d. Wissensch., Berlin 1963 .... 49, 59, 60, 80

[Da 65] Davydov, A. S.; Quantum Mechanics, Pergamon Press, Oxford 1965 .... 41, 46, 217

[Da 66] Davies, K. T. R., Krieger, S. J. und Baranger, M.; Nuclear Phys. **84** (1966) 545 102

[DMP 64] Dietrich, K., Mang, H. J. und Pradal, J., Phys. Rev. **133** (1964) B22 .... 157, 172, 177, 178, 179, 180, 201

[DMP 66] Dietrich, K., Mang, H. J. und Pradal, J.; Z. Physik **190** (1966) 357 157 172, 177, 178, 179, 180

[Ed 64] Edmonds, A. R.; Drehimpulse in der Quantenmechanik, B I-Hochschultaschenb., Band 53/53a, Bibliogr. Institut, Mannheim 1964 .... 28, 41, 46, 76

[EF 57] Elliot, J. P. und Flowers, B. H.; Proc. Roy. Soc. **A 242** (1957) 57 116
[EL 57] Elliot, J. P. und Lane, A. M.; Handbuch d. Physik, Band XXXIX, Springer-Verlag, Berlin 1957 .... 42, 44, 78
[Fa 67] Faessler, A.; Proceedings of the Yugoslave Summer School in Herceg Novi, 1967 157
[Fe 54] Feshbach, H., Porter, C. E. und Weisskopf, V. F.; Phys. Rev. **96** (1954) 448 .... 213, 223, 225
[FH 62] Fuller, E. G. und Hayward, E.; Nuclear Reactions (Herausgeber: Endt, P. M. und Smith, P. B.), Vol. I, North-Holland Publish. Comp., Amsterdam 1962 106
[Fo 30] Fock, V.; Z. Physik **61** (1930) 126 196
[FS 66] Faessler, A. und Sheline, R. K.; Phys. Rev. **148** (1966) 1003 19
[Fu 64] Fultz, S. C., Bramblett, R. L., Caldwell, J. T. und Harvey, R. P.; Phys. Rev. **133** (1964) B. 869 103
[FV 57] Ferrell, R. A. und Visscher, W. M.; Phys. Rev. **107** (1957) 781 91
[FW 55] Friedmann, F. L. und Weisskopf, V. F.; Niels Bohr and the Development of Physics, Pergamon Press, London 1955 223
[GG 59] Goldstone, J. und Gottfried, K.; Nuovo Cimento **13** (1959) 849... 121
[Gi 64] Gillet, V., Green, A. M. und Sanderson, E. A.; Phys. Letters **11** (1964) 44 133
[Go 58] Gorkov, L. P.; Soviet Phys. JETP **7** (1958) 505 122
[GP 63] Goswami, A. und Pal, M. K.; Nuclear Phys. **44** (1963) 294 120
[GR 59] Griffin, J. J. und Rich, M.; Phys. Rev. Letters **3** (1959) 342... 192, 193
[Gr 60] Gross, E. P.; Nuclear Phys. **14** (1960) 389 183
[GS 64] Gillet, V. und Sanderson, E. A.; Nuclear Phys. **54** (1964) 472 133
[GV 62] Gillet, V. und Vinh Mau, N. N.; Phys. Letters **1** (1962) 25 ... 132, 133
[GV 64] Gillet, V. und Vinh Mau, N. N.; Nuclear Phys. **54** (1964) 321 133
[Ha 28] Hartree, D. R.; Proc. Cambridge Phil. Soc. **24** (1928) 89 196
[He 61] Hertz, G. (Herausgeber); Lehrbuch der Kernphysik, Band II, Physik der Atomkerne, W. Dausien, Leipzig 1961... 30, 63, 71, 74, 214
[HJ 62] Hamada, T. und Johnston, I. D.; Nuclear Phys. **34** (1962) 382 92
[Ho 56] Hofstadter, R., Hahn, B. und Ravenhall, D. G.; Phys. Rev. **101** (1956) 1131 19
[HS 57] Hulthén, L. und Sugawara, M.; Handbuch d. Physik, Band XXXIX, Springer-Verlag, Berlin 1957 89
[Kl 52] Klinkenberg, P. F. A.; Revs. Modern Phys. **24** (1952) 63 62
[KP 38] Kapur, P. L. und Peierls, R. E.; Proc. Roy. Soc. **A 166** (1938) 277 . 216
[Ku 66] Kuo, T. T. S., Baranger, E. und Baranger, M.; Nulcear Phys. **81** (1966) 241 170
[La 55] Lane, A. M., Thomas, R. G. und Wigner, E. P.; Phys. Rev. **98** (1955) 693 224
[La 59] Landau, L. D.; Soviet Phys. JETP **8** (1959) 70 (Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz. **35** (1958) 97) 230
[La 64] Lane, A. M.; Nuclear Theory, W. A. Benjamin, Inc., New York 1964 133

[LB 61] Landolt.-Börnstein; Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie, Gruppe I, Band 1, Springer-Verlag, Berlin 1961 136
[Li 59] Lipkin, H. J.; Lecture Notes, Brand. Univ., Summer Inst. in Theor. Phys., 1959 181
[LL 65] Landau, L. D. und Lifschitz, E. M.; Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III, Quantenmechanik, Akademie-Verlag, Berlin 1965 18, 90, 91
[LM 66] Löbner, K. E. G. und Malmskog, S. G.; Nuclear Phys. **80** (1966) 505 80
[LR 54] Lane, A. M. und Radicati, L. A.; Proc. Phys. Soc. **A 67** (1954) 167 56
[LS 62] Lane, A. M. und Soper, J. M.; Nuclear Phys. **37** (1962) 663 37
[Lü 60] Lüders, G.; Z. Naturforschung **15a** (1960) 371 187
[LW 61] Lemmer, R. H. und Weisskopf, V. F.; Nuclear Phys. **25** (1961) 624 177
[Ma 50] Mayer, M. G.; Phys. Rev. **78** (1950) 22 .... 30, 137
[Ma 58] Maris, Th. A. J., Hillman, P. und Tyrén, H.; Nuclear Phys. **7** (1958) 1 33
[Ma 65] Mang, H. J., Poggenburg, J. K. und Rasmussen, J. O.; Nuclear Phys. **64** (1965) 353 .... 161, 201, 202
[Ma 66] Mang, J. H., Rasmussen, J. O. und Rho, M.; Phys. Rev. **141** (1966) 941 201
[MB 65] Muthukrishnan, R. und Baranger, M.; Phys. Letters **18** (1965) 160 102
[MC 62] Mukherjee, P. und Cohen, B. L.; Phys. Rev. **127** (1962) 1284 33
[Me 61] Messiah, A.; Quantum Mechanics, North-Holland Publish. Comp., Amsterdam 1961 .... 46, 93, 101, 189, 256
[Mi 63] Migdal, A. B.; Soviet Phys. JETP **16** (1963) 1366 (Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz. **43** (1962) 1940) 234, 236
[Mi 64] Migdal, A. B.; Nuclear Phys. **57** (1964) 29 .... 230, 234
[Mi 67] Migdal, A. B.; Theory of Finite Fermi Systems, Interscience Publishers; J. Wiley & Sons, New York 1967 .... 235, 236
[Mk 64] Mikeska, H. J.; Dissertation, Techn. Hochschule München 1964 ... 128
[MJ 55] Mayer, M. G. und Jensen, J. H. D.; Elementary Theory of Nuclear Shell Structure, J. Wiley & Sons, New York 1955 ... 21, 24, 29, 43, 55
[MN 55] Mottelson, B. R. und Nilsson, S. G.; Phys. Rev. **99** (1955) 1615 ... 72
[MN 59] Mottelson, B. R. und Nilsson, S. G.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Skrift. **1** (1959) No. 8 .... 70, 80
[Mo 53] Moszkowski, S. A.: Phys. Rev. **89** (1953) 474 56
[Mo 57] Moszkowski, S. A.; Handbuch d. Physik, Band XXXIX, Springer-Verlag, Berlin 1957 .... 20, 26, 57, 67, 76, 80
[Mo 58] Mottelson, B. R.; Cours de L'Ecole d'Eté de Physique Théorique des Houches 1958, Dunod, Paris 1959 .... 137, 139, 187
[Ni 55] Nilsson, S. G.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. **29** (1955) No. 16 .... 57, 62, 65, 173
[NK 59] Newby jr., N. und Konopinski, E. J.; Phys. Rev. **115** (1959) 434 143
[NN 65] Nathan, O. und Nilsson, S. G.; Alpha-, Beta-, Gamma-Ray Spectroskopy (Herausgeber: Kai Siegbahn), Vol. I, North-Holland Publish. Comp., Amsterdam 1965 .... 76, 77, 79, 80

[No 64] Nozières, P.; Theory of Interacting Fermisystems, W. A. Benjamin, Inc., New York 1964 234

[NP 61] Nilsson, S. G. und Prior, O.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd. **32** (1961) No. 16 .... 141, 161, 167, 168, 192

[Pe 63] Perey, F. G.; Phys. Rev. **131** (1963) 745 229

[PY 57] Peierls, R. E. und Yoccoz, J.; Proc. Phys. Soc. **A70** (1957) 381 .. 194, 204

[Ra 42] Racah, G.; Phys. Rev. **62** (1942) 438 140

[Ri 65] Ripka, G.; The Hartree-Fock Theory and Nuclear Deformations, Lectures in Theoretical Physics 1965, Vol. IIIc, University of Colorado Press, Boulder 102

[RY 66] Rouhaninejad, H. und Yoccoz, J.; Nuclear Phys. **78** (1966) 353 204, 205

[Sc 60] Schintlmeister, J. (Herausgeber); Der Isospin von Atomkernen, Akademie-Verlag, Berlin 1960 37

[Sh 53] Shalit, A. de; Phys. Rev. **91** (1953) 1479 .... 30, 140

[SJ 50] Steinwedel, H. und Jensen, J. H. D.; Z. Naturforschung **5a** (1950) 413 105

[So 61] Soloviev, V. G.; Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Skrift. **1** (1961) No. 11 168

[St 52] Stech, B.; Z. Naturforschung **7A** (1952) 401 .... 50, 55

[St 65] Stephens, F. S., Lark, N. L. und Diamond, R. M.; Nuclear Phys. **63** (1965) 82 58

[Te 58] Temmer, G. M.; Revs. Modern Phys. **30** (1958) 498 60

[Th 1 60] Thouless, D. J.; Nuclear Phys. **21** (1960) 225 119

[Th 2 60] Thouless, D. J.; Nuclear Phys. **22** (1960) 78 127

[Th 64] Thouless, D. J.; Quantenmechanik der Vielteilchensysteme, B I-Hochschultaschenb., Band 52/52a, Bibliogr. Institut, Mannheim 1964 .... 119, 234, 245, 253

[TP 62] Thouless, D. J. und Peierls, R. E.; Nuclear Phys. **38** (1962) 154 .... 194, 204, 207, 209, 210, 211

[To 49] Townes, C. H., Foley, H. M. und Low, W.; Phys. Rev. **76** (1949) 1415 44

[Va 61] Valatin, J. G.; Phys. Rev. **122** (1961) 1012 .... 188, 257

[Vi 1 57] Villars, F.; Nuclear Phys. **3** (1957) 240 181

[Vi 2 57] Villars, F., Ann. Rev. Nuclear Sci. **7** (1957) 185 181

[Vi 58] Villars, F.; Ann. Phys. **5** (1958) 224 181

[We 51] Weisskopf, V. F.; Phys. Rev. **83** (1951) 1073 53

[WE 61] Wigner, E. P. und Eisenbud, L.; Einführung in die Kernphysik, BI-Hochschultaschenb., Band 16, Bibliogr. Institut, Mannheim 1961 12

[Wi 37] Wigner, E. P.; Phys. Rev. **51** (1937) 106 34

[Yo 57] Yoccoz, J.; Proc. Phys. Soc. **A70** (1957) 388 .... 204, 205, 207

[Ze 65] Zeh, H. D.; Z. Physik **188** (1965) 361 .... 194, 205

SACHVERZEICHNIS

V

W

Y

Z

Topologische Vektorräume **(164/164a)**
von A. P. Robertson, *Prof. an der Univ. Keele, und* Wendy Robertson. *169 Seiten.*

Mengenlehre I (Einführung in die axiomatische Mengenlehre) **(56/56a)**
von Dr. Jürgen Schmidt, *apl. Prof. an der Univ. Bonn.* I Grundbegriffe, *241 Seiten mit Abb. und ein Faltblatt.*

Transzendente Zahlen **(137*)**
von Dr. Carl Ludwig Siegel, *Institute for Advanced Study, Princeton, New Jersey. Prof. em. an der Univ. Göttingen. 87 Seiten.*

Funktionalanalysis I **(82/82a)**
von Dr. Heinz Unger, *o. Prof. an der Univ. Bonn, Direktor des Instituts für Angewandte Mathematik, und Dr.* Erika Pflaumann, *Institut für Angewandte Mathematik an der Univ. Bonn. Etwa 220 Seiten.*

Konvexe Mengen **(402/402a)**
von Prof. Dr. Frederick A. Valentine, *Department of Mathematics, University of California, Los Angeles. Etwa 260 Seiten mit Abb.*

Algebraische Zahlentheorie **(136/136a)**
von Hermann Weyl, *Institute for Advanced Study, Princeton, New Jersey. 222 Seiten.*

Darstellende Geometrie I, II **(96/96a, 133/133a)**
von Dr. Walter Wunderlich, *o. Prof. an der Techn. Hochschule Wien.*
I *187 Seiten mit zahlreichen Abb.* — II *234 Seiten mit Abb.*

In Vorbereitung: Barner, Analytische Geometrie I-III · Behnke/Bosdorf, Zahlentheorie · Brosowski, Approximation reeller Funktionen I-III · Brosowski, Kurvenlexikon · Börsch/Supan, Einführung in die numerische Mathematik · Dembowski, Gruppentheorie · Dombrowski, Integralrechnung · Dinghas, Einführung in die Cauchy-Weierstraßsche Funktionentheorie · Erwe, Aufgabensammlung zur Infinitesimalrechnung · Felscher, Mathematische Logik · Grotemeyer, Topologie · Günzler, Integration · Heinhold/Kulisch, Analogrechner · Holmann, Alternierende Differentialformen · Holmann, Lineare und multilineare Algebra · Koch/Griesel, Einführung in die Mathematik für Naturwissenschaftler · Laugwitz, Ingenieurmathematik VI · Laugwitz, Integralgleichungen · Laugwitz, Kontinuum · Laugwitz/Vollrath, Schulmathematik vom höheren Standpunkt als Einführung in das Hochschulstudium · Lebedev, Spezielle Funktionen und ihre Anwendungen · Leis, Aufgabensammlung der Partiellen Differentialgleichungen 2. Ordnung · Leichtweiss, Riemannsche Geometrie · Lingenberg, Grundlagen der Geometrie I, II · Lorenz, Formale Logik · Martensen, Partielle Differentialgleichungen · Maurer, Theoretische Grundlagen der Programmiersprachen · Meschkowski, Mathematiker-Lexikon · Meschkowski/Lessner, Aufgabensammlung zur Einführung in die moderne Mathematik · Müller, C., Vorlesungen über Kugel- und Besselfunktionen · Noble, Numerisches Rechnen II · Peschl, Differentialgeometrie · Peschl, Funktionentheorie II · Peschl, Vektoranalysis · Peschl/Erwe, Partielle Differentialgleichungen erster Ordnung · Pumplün/Röhrl, Einführung in die Theorie der Kategorien · Reiffen/Scheja/Vetter, Algebra · Reiffen/Vetter, Prüfungs-Repetitorium · Rothstein/Kopfermann, Funktionentheorie mehrerer komplexen Veränderlichen · Schwartz, Mathematische Methoden der Physik · Schwarz, Primzahlen · Steiner, Aufbau des Zahlensystems: Von den natürlichen zu den komplexen und hyperkomplexen Zahlen · Strassl, Nomographie · Unger/Pflaumann, Funktionalanalysis II, III · Volkovyskii/Lunts/Aramanovich, Übungsaufgaben zur Funktionentheorie · Weise, Einführung in die Topologie.

B·I-HOCHSCHULSKRIPTEN

Nichtlineare Tschebyscheff-Approximation **(808/808a)**
von Dr. Bruno Brosowski, *Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München, Privatdozent an der Univ. München. Etwa 180 Seiten.*

Contributions to the Method of Lie Series **(802/802a*)**
von Dr. Wolfgang Gröbner, *o. Prof. an der Univ. Innsbruck, und Dr.* H. Knapp, *Dozent an der Univ. Innsbruck. 265 Seiten.*

Untersuchungen zum Vierfarbenproblem **(810/810a/810b)**
von Prof. Dr. HEINRICH HEESCH, *Techn. Hochschule Hannover. Etwa 380 Seiten mit Abb.*

Allgemeine Algebra I **(803/803a)**
von Dr. JÜRGEN SCHMIDT, *apl. Prof. an der Univ. Bonn. Etwa 260 Seiten.*

FORTRAN IV-Programmieranleitung **(804*)**
von Dipl.-Math. KARL H. MÜLLER *und Dipl.-Math.* IRMTRAUD STREKER, *Zentrales Recheninstitut der Univ. Frankfurt am Main. 140 Seiten.*

BERICHTE aus dem MATHEMATISCHEN FORSCHUNGSINSTITUT OBERWOLFACH

1: Mathematische Methoden der Himmelsmechanik und Astronautik
Herausgegeben von Dr. EDUARD STIEFEL, *o. Prof. für Angewandte Mathematik an der Eidg. Technischen Hochschule Zürich. 350 Seiten mit Abb.*

2: Algebraische Zahlentheorie
Herausgegeben von Prof. Dr. HELMUT HASSE, *Direktor des Mathematischen Seminars der Univ. Hamburg, und Prof. Dr.* PETER ROQUETTE, *Direktor des Mathematischen Instituts der Univ. Tübingen. 272 Seiten.*

MATHEMATISCHE TAFELWERKE

12stellige Tafeln der Legendre-Polynome **(320a–e)**
von Dr. WERNER BUNDKE, *Institut für Angewandte Physik der Univ. Frankfurt am Main. 352 Seiten.*

Mathematische Formelsammlung **(13)**
von Dr. KARL ROTTMANN, *2., verbesserte Auflage. 176 Seiten mit 39 Abb.*

Mathematische Funktionstafeln **(14/14a)**
von Dr. KARL ROTTMANN. *204 Seiten.*

Siebenstellige dekadische Logarithmen **(17/17a)**
von Dr. KARL ROTTMANN. *194 Seiten.*

Siebenstellige dekadische Logarithmen der trigonometrischen Funktionen **(26/26a/26b)**
von Dr. KARL ROTTMANN. *440 Seiten.*

Winkelfunktionen und logarithmische Funktionen **(113/113a)**
von Dr. KARL ROTTMANN. *273 Seiten.*

Spezielle Funktionen der mathematischen Physik und Chemie **(54*)**
Mathematische Formelsammlung II
von IAN N. SNEDDON, *M. A., D. Sc., Simson Prof. of Mathematics in the University of Glasgow. 166 Seiten mit 14 Abb.*

Spezielle Funktionen der mathematischen Physik Tafeln I und II **(55/55a, 76/76a)**
von KURT UHDE, *Brown, Boveri/Krupp Reaktorbau GmbH, Mannheim.*
I *267 Seiten* — II *211 Seiten.*

PHYSIK

Kernmodelle **(203/203a)**
von Dr. GERMAN BAUMGÄRTNER *und Dipl.-Phys.* PETER SCHUCK, *Physik Derpartment der Techn. Hochschule München, Abt. Theorie. Etwa 240 Seiten mit Abb.*

Neutronenphysikalisches Praktikum I, II **(170/170a, 171/171a)**
von Dr. FRIEDRICH BENSCH *und Dr.* CARL M. FLECK, *Atominstitut der österreichischen Hochschulen, Wien.*
I Einführung in die Physik und Technik der Aktivierungssonden. *Etwa 260 Seiten mit Abb.*
II Ausgewählte Versuche und ihre Grundlagen. *Etwa 260 Seiten mit Abb.*